



**Universidade de Aveiro** Departamento de Matemática  
**1999**

**António José Batel Anjo**

**A Têmpera Controlada pela Entropia  
Uma caracterização formal**

dissertação apresentada à Universidade de Aveiro para cumprimento dos requisitos necessários à obtenção do grau de Doutor em Matemática. Trabalho realizado sob a orientação científica da Prof. Doutora Maria Rosália Dinis Rodrigues, Professora Auxiliar do Departamento de Matemática da Universidade de Coimbra

**o júri**

**presidente**

Reitor da Universidade de Aveiro

**vogais**

António Dias de Figueiredo  
Professor Catedrático da Faculdade de Ciências e  
Tecnologia da Universidade de Coimbra

Maria Beatriz Fernandes Matias  
Professora Associada da Universidade de Aveiro

Domingos Moreira Cardoso  
Professor Associado da Universidade de Aveiro

Helena Ramalhinho Lourenço  
Professora Auxiliar do Departamento d'Economia e  
Empresas da Universidad Pompeu Fabra, Barcelona,  
Espanha

Maria Rosália Dinis Rodrigues  
Professora Auxiliar da Faculdade de Ciências e Tecnologia  
da Universidade de Coimbra (Orientadora)

## **agradecimentos**

À Prof. Rosália pela forma como conduziu a orientação deste trabalho, em que a amizade e a liberdade de pensamento estiveram sempre presentes.

À Paula Carvalho e ao Prof. David Vieira pela leitura atenta deste trabalho e por todo o apoio ao longo destes anos.

À Andreia Hall, Luís Comparada, Ana Maria Almeida e Manuel Rodrigues pela dedicação com que leram este trabalho.

À Auzira Bettencourt por ter estado presente em todos os momentos.

À Maria João e à Rosa Elisa por terem estado, efectivamente, presentes em todos os momentos.

À Zhang Yulin pelo desenho do character que se encontra na capa e que representa a Entropia.

## **resumo**

Nesta dissertação é proposto um modelo para a Têmpera Simulada, como abordagem metaheurística para a resolução de problemas de Optimização Combinatória.

O modelo é construído tendo por base o conceito de Entropia entendido no contexto da Teoria da Informação.

Para este modelo é feita uma caracterização formal e são estabelecidas propriedades a partir das quais se demonstram diversos resultados.

A partir deste modelo são deduzidos algoritmos adaptáveis e gerados automaticamente em tempo real. São apresentados testes computacionais da aplicação de um algoritmo assim construído ao Problema do Caixeiro Viajante.

**abstract**

In this dissertation a new model for Simulated Annealing is presented, as a meta-heuristic approach to Combinatorial Optimisation problems.

The model is built upon the concept of Entropy, in the sense of Information Theory. A formal characterisation is established and several results, such as the asymptotic convergence of the method, are proved.

A class of algorithms is then derived from the model, which are adaptable and automatically generated in running time.

Computational results of the application of a simple algorithm of that class, where applied to the Travelling Salesman Problem, are also reported.

# Índice

<b>Introdução</b>	<b>I</b>
<b>1 Optimização Combinatória</b>	<b>1</b>
1.1 Problemas de Optimização Combinatória . . . . .	2
1.2 Teoria da Complexidade . . . . .	4
1.3 O Problema do Caixeiro Viajante . . . . .	6
1.4 Metaheurísticas . . . . .	8
1.4.1 Algoritmos Genéticos . . . . .	9
1.4.2 Redes Neurais e Máquinas de Boltzmann . . . . .	11
<b>2 Têmpera Simulada</b>	<b>13</b>
2.1 Da Física à Optimização Combinatória . . . . .	14
2.2 Da Optimização Combinatória à Física . . . . .	16
2.3 Cadeias de Markov . . . . .	19
2.4 Modelo “clássico” da Têmpera . . . . .	25
2.4.1 Existência e Convergência da Distribuição Estacionária . . . . .	27
2.5 Autómatos Estocásticos . . . . .	29
2.5.1 Classificação dos Autómatos Estocásticos . . . . .	30
2.5.2 Autómatos Estocásticos Modelos P e S . . . . .	31
2.6 Comportamento Assimptótico das Transições . . . . .	35

<b>3</b>	<b>Entropia</b>	<b>39</b>
3.1	O Conceito de Entropia . . . . .	40
3.2	Domínios de Aplicação . . . . .	41
3.3	Teoria da Informação . . . . .	43
3.3.1	O Teorema de Shannon . . . . .	44
3.3.2	Entropia Conjunta e Condicionada . . . . .	46
3.3.3	Entropia de uma variável aleatória contínua . . . . .	47
3.4	Entropia Máxima . . . . .	49
3.4.1	Distribuição Gaussiana . . . . .	50
3.4.2	Distribuição Exponencial . . . . .	53
3.5	Entropia Máxima e Sequências Típicas . . . . .	56
3.5.1	Entropia de Partições e Variáveis Aleatórias . . . . .	57
<b>4</b>	<b>A Têmpera controlada pela Entropia</b>	<b>63</b>
4.1	O Modelo . . . . .	65
4.2	A Entropia da Têmpera . . . . .	68
<b>5</b>	<b>Construção de Algoritmos</b>	<b>71</b>
5.1	Estimadores . . . . .	72
5.2	Um Exemplo de Algoritmo . . . . .	73
5.3	Resultados . . . . .	74
5.4	Discussão . . . . .	75
	<b>Conclusões e Trabalho Futuro</b>	<b>83</b>
	<b>Referências</b>	<b>87</b>

# Introdução

O texto que se apresenta da autoria de Marvin Minsky, do Laboratório de Inteligência Artificial do MIT, traduz de uma forma quase perfeita o espírito com que se iniciou este trabalho.

*Gosto de resolver problemas noutros campos – engenharia, matemática, física e biologia. Mas sempre que um problema parece muito difícil ponho-me a perguntar a mim próprio porque será ele tão difícil, e lá estou eu de novo na psicologia! É claro que todos nós usamos técnicas de auto-ajuda conhecidas, como perguntar: “Estarei a representar o problema de uma forma desadequada?” ou “Estarei a tentar utilizar um método pouco apropriado?”. No entanto, um outro processo é perguntar: “Como poderia eu construir uma máquina para resolver este problema?”*

*Há um século, não haveria qualquer possibilidade nem mesmo de começar a pensar em fazer máquinas inteligentes. Hoje, porém, há numerosas boas ideias a este respeito. O problema é que quase ninguém pensou o suficiente sobre o modo de juntar todas essas ideias.*

Marvin Minsky, *A Terceira Cultura*, 1997

A leitura deste texto entendida no contexto do trabalho que se vai descrever coloca desde logo duas questões: que “máquina inteligente” poderá resolver o Problema do Caixeiro Viajante? O esforço maior deve ser feito na procura de uma máquina ou na demonstração da existência, ou não, de um algoritmo que o resolva?

O termo “máquina” é usado no sentido de algoritmo, ou de uma forma mais geral de um método ou de uma estratégia geradora de algoritmos. Pretende-se com este método resolver problemas de Optimização Combinatória pertencentes às classes de complexidade NP. De uma forma abreviada, os problemas estão divididos em classes consoante a sua complexidade.



Os problemas “tratáveis” pertencem à classe P, isto é, existe um algoritmo que os resolve em tempo polinomial. Por outro lado existem problemas “intratáveis”, no sentido em que ainda não se encontrou um algoritmo que os resolva em tempo polinomial, que pertencem à classe NP. Existe uma subclasse de NP, a classe dos problemas NP-completos, da qual o Problema do Caixeiro Viajante é um paradigmático representante. Esta classe apresenta uma característica interessante: se alguma vez for encontrado um algoritmo em tempo polinomial para algum problema desta classe então existe um algoritmo em tempo polinomial para todos os problemas a ela pertencentes.

A procura da solução para o Problema do Caixeiro Viajante, ou da máquina que o resolva, conduzirá à criação de mecanismos de resolução híbridos, isto é, estratégias multidisciplinares. Terão de efectuar-se *pontes* entre os diversos campos da ciência, onde a *Algoritmia* ocupará um lugar central de confluência das mais variadas estratégias. O Problema do Caixeiro Viajante, como representante de uma classe mais vasta de problemas será então, usando uma linguagem bélica, atacado, não pelos conhecimentos desenvolvidos numa única área, mas pelo resultado da sistematização de diversas teorias. E a demonstração de que  $P=NP$  (ou a mais plausível de que  $P \neq NP$ ) será resultado de abordagens sistemáticas usando estratégias provenientes de diversas áreas do saber.

Em ciência, a maioria dos processos desenvolvem-se, geralmente, partindo de uma fase experimental e seguindo posteriormente o caminho da formalização. O resultado deste processo é o desenvolvimento de teorias matemáticas mais ou menos complexas. As metaheurísticas, ou as heurísticas com inspiração em conceitos, não fogem a esta regra, observando-se actualmente uma forte necessidade de se encontrarem ferramentas matemáticas que as possam modelar, estabelecendo-se deste modo, fundamentos que as suportem do ponto de vista teórico e prático. A criação de um modelo aparece, assim, como o primeiro desafio. Segundo J. Neyman<sup>1</sup>, sempre que se está perante um fenómeno que se pretende estudar, é essencial começar por construir um modelo, que pode ser determinista ou estocástico. O modelo deve simplificar a observação e alguns pormenores observados devem ser retirados. É este ponto a pedra de toque de todo o modelo: até onde é que os pormenores desprezados são ou não importantes e determinantes para a representatividade do modelo. A verificação da adequação é difícil uma vez que matematicamente o modelo pode estar correcto e, no entanto, estar em discordância com os resultados observados.

---

<sup>1</sup> *University of California Publications in Statistics*, Vol. I, University of California Press, 1945

## Introdução

As características do modelo são de extrema importância para o estabelecimento de propriedades do método, uma das quais se revela de grande utilidade – a demonstração de convergência.

*Para quê demonstrar<sup>2</sup> a convergência de uma metaheurística?*

A resposta a esta pergunta está intimamente ligada ao contexto onde ela é feita. Se o objectivo concreto é o da construção de um modelo matemático formal, é importante que uma das principais propriedades seja a sua convergência mesmo que este resultado não tenha uma consequência prática efectiva. No entanto, acredita-se que se as principais propriedades dos modelos, incluindo as condições de convergência, forem projectadas nos algoritmos o seu desempenho será muito melhor.

Por definição, uma metaheurística é uma estratégia usada para obter soluções de boa qualidade e, eventualmente, soluções óptimas. Nos problemas que podem ser resolvidos por algoritmos existe um formalismo matemático que permite a sua classificação. No entanto, nos problemas cuja resolução assenta em metaheurísticas, esta classificação ainda não foi encontrada. Uma via para ultrapassar esta situação consiste em modelar o método e encontrar um conjunto de propriedades que possam, de alguma forma, classificar as concretizações do problema. A demonstração de convergência torna-se muito importante, uma vez que é uma garantia de que o modelo é *consistente*, no sentido em que, para além de representar a realidade, contém a informação necessária para que, sob certas condições, o método convirja para uma solução óptima. Esta abordagem clarifica o funcionamento das metaheurísticas e estabelece de forma inequívoca as condições necessárias à sua convergência.

Importa encontrar métodos de resolução cuja solução tenha a melhor *qualidade* possível. Estas estratégias são, em geral, multidisciplinares e têm em conta a natureza das diversas concretizações.

A abordagem usada nas metaheurísticas consiste na observação da realidade, a observação do seu desempenho, para a qual se constrói um modelo e dele se retiram todas as propriedades para a construção de algoritmos. A validação dos algoritmos dá uma perspectiva do modelo que pode, obviamente, ser modificado. Desta forma obtêm-se modelos cada vez mais elaborados e ricos em informação.

---

<sup>2</sup>Questão levantada por David Jonhson aquando da apresentação da comunicação *Entropy-driven Annealing*, no MIC99.

A palavra *método* tem aqui uma conotação diferente da habitual como sinónimo de algoritmo. No contexto deste trabalho, esta palavra é sinónimo de estratégia, da qual se podem obter vários algoritmos por concretização de um conjunto de decisões. O mote deste trabalho foi dado durante a realização das Provas de Aptidão Pedagógica e Capacidade Científica [BA94], onde se estudaram métodos heurísticos para a resolução de problemas das classes NP. Nesse trabalho foi dada ênfase à *Têmpera Simulada*, tendo sido estudada a sua origem e a forma clássica de a modelar. Desse trabalho teórico muito pouco se podia transportar para a criação de algoritmos, nomeadamente para a manipulação dos parâmetros que os compõem. E foi deste estado de aprendizagem que se iniciou uma nova fase: encontrar um modelo por forma a que os parâmetros surgissem de uma forma automática e adaptados as características intrínsecas de cada concretização do problema. Partiu-se, assim, para a criação de estratégias inspiradas em conceitos como forma de identificar as características intrínsecas de cada concretização. Neste trabalho, o conceito usado foi o de Entropia, a metaheurística é a *Têmpera Simulada* e teve como resultado a *Simulação da Têmpera controlada pela Entropia*, ou simplesmente a *Têmpera controlada pela Entropia*.

O trabalho começa com a exposição das principais ideias de Optimização Combinatória, onde o destaque recai sobre o Problema do Caixeiro Viajante e a Teoria da Complexidade. Em seguida são apresentados os principais métodos de resolução para problemas de Optimização Combinatória da Classe NP – as metaheurísticas.

Referem-se as principais características dos Algoritmos Genéticos, baseados nas ideias de Charles Darwin de evolução, e na sua adaptação a problemas combinatórios. O funcionamento do cérebro inspirou o desenvolvimento das Redes Neurais como método de resolução de problemas de Optimização Combinatória. A junção das Redes Neurais com a *Têmpera Simulada*, deu origem a um novo método conhecido como Máquinas de Boltzmann. Em ambas as abordagens o uso de técnicas de computação paralela é uma característica fundamental.

Nas páginas seguintes apresenta-se a *Têmpera Simulada*. Inspirada no processo Físico da *Têmpera* foi desenvolvida, nos anos oitenta por Kirkpatrick, Gelatt e Vecchi através da introdução dos conceitos da *Têmpera* na Optimização Combinatória, a mais promissora metaheurística conhecida como *Têmpera Simulada*. Referem-se duas formas de modelar a *Têmpera Simulada*, uma através de Cadeias de Markov e outra fazendo uso da teoria de Autómatos Estocásticos e as correspondentes estratégias para a demonstração da con-

## Introdução

vergência. Apresenta-se ainda uma demonstração de que, sob certas condições, o custo das diferentes soluções converge para o custo da solução ótima.

O conceito de Entropia, que se apresenta no terceiro capítulo, merece um lugar de destaque neste trabalho. Surgida da Termodinâmica, a Entropia tem vindo a ocupar de uma forma sistemática um lugar de destaque em diversos domínios do saber. Procurou-se perceber como se relaciona o conceito entre os diferentes domínios, quais as propriedades mais importantes e como o aplicar aos algoritmos para a resolução de problemas de Optimização Combinatória da classe NP. Estudou-se a forma apropriada de adaptar alguns conceitos da Têmpera de sólidos à Têmpera Simulada, com o objectivo de gerar algoritmos adaptados a cada concretização de um problema. Um dos conceitos foi o de Entropia usado não no sentido físico do termo, mas no contexto da Teoria da Informação de Claude Shannon. Este conceito é a peça fundamental deste trabalho e é com ela que são contruídos os alicerces da *Têmpera controlada pela Entropia*.

No capítulo seguinte, apresenta-se este novo modelo que assenta na descrição das transições em duas distribuições de probabilidades. É apresentada a demonstração de que a distribuição Gaussiana/Normal, que descreve o comportamento do conjunto das transições aleatórias, maximiza a Entropia. Através da Entropia máxima cada concretização do problema é caracterizada e a temperatura inicial, principal parâmetro do algoritmo, é estabelecida. É também apresentada a demonstração de que a distribuição Exponencial, que descreve o conjunto de transições positivas, maximiza a Entropia. Estes dois resultados fornecem as condições necessárias para construir algoritmos, cujo funcionamento é controlado pela observação do valor da Entropia.

Por fim, constrói-se um exemplo de algoritmo baseado na Têmpera controlada pela Entropia, por uma realização simples de um esquema de arrefecimento. O algoritmo é aplicado a dois problemas. O primeiro consiste na minimização da soma dos elementos de um vector binário de dimensão  $n$ . Trata-se de um problema muito simples de formular e para qual não se conhece um algoritmo polinomial. O segundo problema a ser testado foi o famoso Problema do Caixeiro Viajante. A Entropia tem aqui um papel crucial no sentido em que aponta caminhos muito interessantes para uma classificação em classes de concretizações de um problema NP.

As linhas finais deste trabalho são dedicadas à apresentação daquilo que se achou serem as principais conclusões, assim como a descrição de um conjunto de outros desenvolvimentos

a serem tratados num futuro próximo.

## Capítulo 1

# Optimização Combinatória

*“What’s new?” is an interesting and broadening eternal question, but one which, if pursued exclusively, results only in a endless parade of trivial and fashion, the silt of tomorrow. I would like, instead, to be concerned with the question “What is best?”, a question whose answers tend to move the silt downstream.*

Robert M. Pirsig, *Zen and the Art of Motorcycle Maintenance*, 1974

Qual é o mínimo (máximo)? A questão coloca-se em todos os problemas de optimização, nos quais se procura “o melhor” de entre uma colecção de “objectos” matemáticos. Ao longo do tempo os problemas têm vindo a ser classificados segundo vários critérios, que vão desde a natureza das variáveis envolvidas até à dificuldade da sua resolução.

Consoante o tipo de variáveis que se usam na modelação do problema resultam de imediato duas classes: problemas contínuos e problemas discretos ou combinatórios. Nos problemas contínuos procura-se, em geral, como solução, um conjunto de números reais ou mesmo uma função. Nos problemas combinatórios procura-se identificar um *objecto* de entre um conjunto, finito ou infinito numerável, como por exemplo, de inteiros, permutações e grafos. A área do saber que estuda estes problemas designa-se por Optimização Combinatória ou Discreta e a forma de os resolver consiste em encontrar uma estratégia que permita identificar uma solução num espaço que é finito e discreto ou infinito numerável. Os problemas pertencentes a esta classe são originários dos diversos campos da ciência, desde problemas de matemática

até questões concretas da engenharia. Quase todos têm uma característica muito particular: a sua formulação é geralmente muito clara e simples, contrastando quase sempre com o elevado grau de dificuldade que a sua resolução comporta. Estes dois factores têm gerado um enorme interesse no seio da comunidade científica que, desde do seu aparecimento no século XVIII, empreendeu diversas tentativas de os resolver de uma forma quase obsessiva.

Com o desenvolvimento dos meios computacionais, estes problemas têm conhecido um maior incremento, sendo mesmo alguns usados para mostrar os verdadeiros limites destes meios.

## 1.1 Problemas de Optimização Combinatória

A solução dum problema de optimização combinatória passa pela identificação de uma *solução óptima*  $s^*$ , neste caso um mínimo, pertencente ao *espaço de soluções*  $S$ , para qualquer *concretização* do problema, isto é, tal que

$$f(s^*) \leq f(s_i) \quad \forall s_i \in S$$

onde  $f : S \mapsto \mathbb{R}$  é a *função objectivo* ou *função custo*. Formalmente,

**Definição 1.1** *uma concretização de um problema de optimização combinatória é definido pelo par  $(S, f)$ , onde  $S$  é o espaço de soluções e  $f$  é a função custo,*

e

**Definição 1.2** *um problema de optimização é o conjunto de todas as suas concretizações.*

De um modo geral, as estratégias de resolução destes problemas dividem-se em dois tipos distintos de abordagem: os *algoritmos* e as *heurísticas*. Um algoritmo determina a solução óptima, uma heurística<sup>1</sup>, ou a criatividade associada à arte de inventar, procura soluções *tão boas* quanto possível, isto é, não garante que a solução encontrada seja óptima.

Quando é que se usa uma ou outra técnica? A resposta está na dificuldade intrínseca ou na complexidade inerente aos diferentes problemas. Para muitos a única estratégia conhecida é a enumeração completa de todo o conjunto de objectos combinatórios e se neste caso,

---

<sup>1</sup>Do grego *heurískein*, que admite como sinónimos “achar”, “descobrir” ou “encontrar” e está relacionada com a arte de inventar ou descobrir. Dicionário da Língua Portuguesa, 6ª ed., Porto Editora

### 1.1. Problemas de Optimização Combinatória

teoricamente, a solução óptima é encontrada, o tempo de resolução pode ser inabarcável. É da necessidade efectiva de resolver problemas desta natureza, aliada ao facto da não existência de um algoritmo polinomial que identifique uma solução em tempo útil, que surgem as técnicas heurísticas.

Os métodos heurísticos necessitam da definição de um mecanismo que permita “viajar” pelo espaço de soluções designado por *mecanismo de transição*. Este mecanismo é definido genericamente pela aplicação  $\tau : S \mapsto S$  tal que, dada uma solução  $s_i$ , uma nova solução  $s_j = \tau(s_i)$  é gerada. A forma como uma nova solução é gerada depende da natureza do problema e existem várias alternativas para esta geração. Estas soluções, que se designam por *vizinhas*, fazem parte do conjunto  $\mathcal{V}(s_i, \tau)$ , designado por *vizinhança* da solução  $s_i$ , formado por todas as soluções que se obtêm por uma única aplicação do mecanismo de transição.

A classificação das soluções óptimas está intimamente associada ao conjunto de onde provêm, isto é, se foram identificadas no conjunto de todas as soluções  $S$ , então trata-se de um *ótimo global*. Se o espaço pesquisado foi apenas um subconjunto próprio de  $S$ , por exemplo um conjunto de soluções vizinhas de uma dada solução, então a solução obtida é um *ótimo local*. Para ilustrar tome-se o Problema do Caixeiro Viajante<sup>2</sup> [BAR98].

Este é o famoso problema, modelado por conceitos da Teoria dos Grafos, cuja procura da solução tem despertado uma enorme curiosidade e interesse junto da comunidade científica. Uma concretização deste problema é definida por um número  $n$  de cidades, ao qual está associado uma matriz distância  $[d_{ij}]$  de dimensão  $n \times n$ , tal que  $d_{ij} \in \mathbb{Z}^+$ . Chama-se *circuito* ao caminho que visita todas as cidades exactamente uma vez e retorna à cidade de partida. Pretende-se identificar o circuito de comprimento total mínimo num espaço de soluções  $S$  definido por todas as permutações circulares  $\pi$  de  $n$  cidades. Uma permutação circular  $\pi$  representa um circuito tomando  $\pi(j)$  como a primeira cidade visitada depois de  $j$ .

A função custo é definida por  $f(\pi) = \sum_{j=1}^n d_{j\pi(j)}$ , e o mecanismo de transição mais conhecido para este problema é designado por *troca múltipla*. Este mecanismo foi apresentado pela primeira vez por Lin [Lin65] e consiste na troca de dois

---

<sup>2</sup>Consciente de que a profissão de caixeiro viajante é actualmente executada por homens e mulheres, não se encontrou um termo que tivesse em conta esta realidade. No entanto, e por sugestão da Prof. Helena Ramalhinho, o termo “agente comercial” parece ser uma boa solução para esta questão.



conjuntos de  $k$  arcos seleccionados aleatoriamente.

Mais adiante este problema será abordado de uma forma mais detalhada. Este e todos os outros problemas podem ser classificados segundo uma teoria que tem vindo a ser desenvolvida desde os anos setenta.

## 1.2 Teoria da Complexidade

A Teoria da Complexidade de Problemas [GJ79, PS87, AR99] tem por objectivo o estabelecimento de uma classificação dos problemas segundo a “dificuldade” da sua resolução.

A medida do tempo de resolução de um problema é definida de acordo com a grandeza da concretização. A complexidade é medida em termos de recursos gastos na resolução do problema, e onde o recurso mais importante é o tempo.

Diz-se que um algoritmo tem um gasto de tempo polinomial se o tempo que demora até obter a solução pretendida é da ordem  $\mathcal{O}(n^k)$ , isto é, se existe um  $k$  tal que  $f(n) = \mathcal{O}(g(n))$ , onde  $f(n) \leq k|g(n)|$  e  $n$  é a grandeza da concretização. Se  $k = 1$  diz-se linear e se  $k = 2$  diz-se quadrático. Se a ordem for  $\mathcal{O}(k^{h(n)})$ , onde  $k$  é constante e  $h(n)$  é polinomial, então o tempo gasto na execução do problema é exponencial. Os problemas que se resolvem em tempo polinomial são chamados *tratáveis* e pertencem à classe P. Problemas para os quais não são conhecidos algoritmos polinomiais são chamados *intratáveis* ou *difíceis*.

Em 1936, Alan Turing provou que existem problemas com um grau de dificuldade tão elevado que são *indecidíveis* no sentido em que não é possível escrever um algoritmo que os resolva. A estratégia para provar que outros problemas são indecidíveis consiste em mostrar que, se o problema pode ser resolvido, então o correspondente problema de paragem pode também ser resolvido.

A Teoria da Complexidade classifica um problema de acordo com o tempo gasto para resolver uma concretização genérica, usando modelos de computação dos quais o mais conhecido é a Máquina de Turing. Os problemas que podem ser resolvidos em tempo polinomial numa máquina de Turing não-determinista pertencem à classe de problemas *não-deterministas em tempo polinomial*, vulgo *classe-NP*.

A resolução de alguns problemas da classe NP requer tempo exponencial, como por exemplo o Problema da Mochila.

## 1.2. Teoria da Complexidade

Pretende-se, dado um conjunto de  $n$  inteiros  $A = \{a_1, \dots, a_n\}$  e um inteiro  $k$ , verificar se existe um subconjunto de  $A$  tal que a soma dos seus elementos seja  $k$ . Para cada subconjunto fixado, é fácil verificar se a soma dos seus elementos é  $k$ , no entanto encontrar o subconjunto nestas condições é muito difícil, uma vez que existem  $2^n$  subconjuntos possíveis e a complexidade algorítmica é  $\mathcal{O}(2^n)$ .

Para este problema não se encontrou um algoritmo polinomial, sendo, no entanto, possível verificar o custo de qualquer solução. A classe NP contém a classe P, uma vez que qualquer problema polinomial que se pode resolver por um algoritmo determinista é também resolvido por um método não-determinista. Se todos os problemas da classe NP puderem ser resolvidos em tempo polinomial, então  $P=NP$ . Muitos problemas da classe NP parecem ser mais “difíceis” do que problemas da classe P, no entanto ainda não foi provado que  $P \neq NP$ . Existe uma subclasse dos problemas NP que reúne problemas importantes pela sua vasta aplicação – a classe dos problemas *NP-completos*. São problemas para os quais ainda não se encontrou um algoritmo polinomial, mas que se alguma vez se encontrar um para um qualquer problema desta classe, então existe um algoritmo polinomial para todos os problemas pertencentes a esta classe [Alm94]. Aceitando como verdadeira a conjectura de que  $P \neq NP$ , então as diferentes classes de problemas estão dispostas de acordo com a figura 1.1. A resolução de

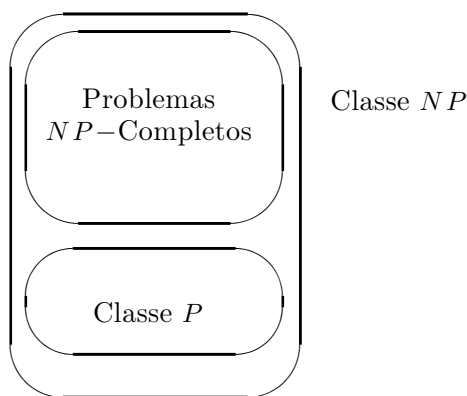


Figura 1.1 Classes de Problemas

problemas das classes NP é um dos maiores desafios das Ciências da Computação. Em particular a resolução do Problema do Caixeiro Viajante, legítimo representante da classe dos problemas NP-completos, tornou-se um verdadeiro teste ao desenvolvimento destas Ciências

nos últimos anos.

### 1.3 O Problema do Caixeiro Viajante

Um dos problemas de matemática cuja solução tem resistido à passagem do tempo é o Problema do Caixeiro Viajante [BAR98]. A sua descrição é muito simples.

*É dada uma lista de cidades. Um vendedor, partindo de uma cidade inicial, pretende visitá-las todas uma única vez, e regressar à cidade de partida por forma a que a distância percorrida seja mínima.*

A expressão “Problema do Caixeiro Viajante” surgiu pela primeira vez no livro *The Traveling Salesman, how he should be and what he should do to get Commissions and to be Successful in his Business. By a veteran Traveling Salesman*, publicado na Alemanha, em 1832. Esta obra apresenta a essência do problema no seu último capítulo, onde se afirma: “*The most important aspect is to cover as many locations as possible, without visiting a location twice [...]*”. Não se sabe ao certo quando este termo entrou nos círculos matemáticos, mas aponta-se como data provável a de 1931-1932 pela mão de Merrill Flood. Posteriormente, o trabalho de Dantzig, Fulkerson e Johnson, em 1954 [DFJ54], cuja formulação se baseava em técnicas de Programação Linear Inteira, trouxe definitivamente o Problema do Caixeiro Viajante para as páginas das revistas científicas transformando-o num marco histórico da Investigação Operacional.

O interesse da comunidade científica pelo Problema do Caixeiro Viajante tem duas razões principais. A primeira, prende-se com o facto de este ser um representante de uma classe muito vasta de outros problemas de Optimização Combinatória. A segunda, reside na simplicidade de formulação e na dificuldade de resolução.

O Problema do Caixeiro Viajante pode ser representado por um grafo  $G$ , onde os vértices são as  $n$  cidades a visitar, e uma matriz  $D = [d_{ij}]$  de distâncias (custos) entre cada par de cidades  $(i, j)$ . Formalmente pretende-se determinar

$$\min_{\pi \in S} f(\pi) = \sum_{i=1}^n d_{i\pi(i)}$$

onde  $S$  é o conjunto de todas as permutações circulares. O Problema do Caixeiro Viajante é chamado *simétrico* se a matriz distância for simétrica. O conjunto de soluções é formado

### 1.3. O Problema do Caixeiro Viajante

por todas as permutações circulares das  $n$  cidades e um circuito é representado por uma permutação  $\pi$  de comprimento  $n$ , isto é,  $\pi = (\pi(1), \dots, \pi(n))$ , em que a cidade seguinte a  $i$  é  $\pi(i)$ .

Na Teoria dos Grafos [Car97] encontram-se as ferramentas necessárias para a modelação deste problema. A solução consiste em encontrar um circuito Hamiltoniano, isto é, um circuito que visita todas as cidades, exactamente uma só vez com custo mínimo. Como não existe uma forma eficiente para determinar a existência de circuitos de Hamilton, este problema foi classificado como sendo NP-completo [GJ79].

O problema tem uma ou várias soluções óptimas com existência garantida pelo facto do conjunto de soluções ser finito. No entanto o cardinal deste conjunto, o número de permutações, é da ordem de  $n!$ . Admitindo que se pode calcular o custo de cada permutação num microsegundo, a solução para uma concretização com 10 cidades seria encontrada em segundos. Levaria meses para 15 cidades e séculos para 20 cidades, usando, obviamente, a pesquisa exaustiva.

Como resolver o Problema do Caixeiro Viajante?

Algumas concretizações, com um pequeno número de cidades, podem ser resolvidas através de algoritmos como *Branch and Bound* e técnicas dele derivadas como o algoritmo de Little [Car97]. No entanto, para concretizações de grandes dimensões, recorre-se a estratégias heurísticas.

Uma das estratégias consiste na utilização de algoritmos de pesquisa local pertencentes à classe de algoritmos de aproximação, e cujo funcionamento é baseado nas transições entre soluções vizinhas. O mecanismo de transição mais usado, proposto por Lin [LK73] e conhecido por *troca dupla*, consiste na geração de novas soluções por troca de dois arcos da seguinte forma: são retirados dois arcos  $(p, \pi(p))$  e  $(q, \pi(q))$  e a nova solução é encontrada formando dois novos arcos no grafo  $(p, \pi(q))$  e  $(q, \pi(p))$ , como se ilustra na figura 1.2. A vizinhança de  $s$ ,  $\mathcal{V}(s, \textit{troca dupla})$  é formada por todos os circuitos gerados pela aplicação do mecanismo de transição “troca dupla”. A dimensão da vizinhança,  $n^2$ , é dada pelo número de possibilidades de escolher  $p$  e  $q$ . Excluindo da vizinhança os circuitos equivalentes ao circuito corrente a dimensão é  $n(n-3)$ . E se o problema for simétrico, a dimensão da vizinhança é reduzida para  $\frac{n(n-3)}{2}$ . O algoritmo inicia a pesquisa com uma solução inicial, geralmente escolhida ao acaso, e pesquisa continuamente na vizinhança da solução corrente uma solução de mais baixo custo. A grande dificuldade deste tipo de abordagem consiste no facto de que o algoritmo tende a

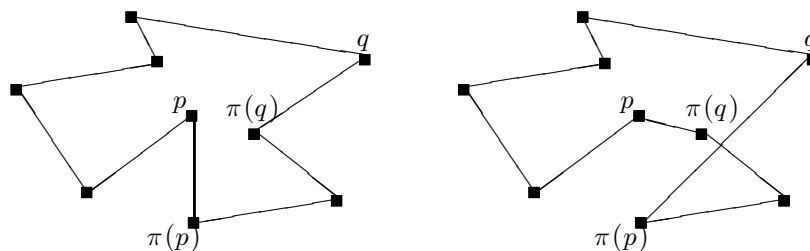


Figura 1.2 Exemplo do mecanismo de transição *troca dupla*

parar num dos muitos mínimos locais que as funções objectivo possuem. Para evitar esta situação têm sido desenvolvidas muitas técnicas de aproximação, das quais se destaca uma classe particularmente interessante, cuja inspiração advém da observação da natureza. Esta classe de metaheurísticas inclui, entre outros, os Algoritmos Genéticos, Redes Neurais e a Têmpera Simulada e todas conseguem encontrar soluções de boa qualidade em tempo útil.

Muitos problemas podem ser formulados como um Problema do Caixeiro Viajante. As redes de computadores, o sequenciamento de tarefas e a cristalografia, são alguns exemplos [PS87].

## 1.4 Metaheurísticas

*Although this may seem a paradox, all exact science is dominated by the idea of approximation.*

Bertrand Russel

Uma heurística, termo associado à arte de inventar, é um processo criativo usado na resolução de problemas para os quais não existe algoritmo. Estas estratégias conduzem, em geral, a soluções de *boa qualidade*. Esta expressão faz todo o sentido uma vez que nestes métodos não existe garantia de que a solução encontrada seja óptima. Estas estratégias podem ser classificadas em duas grandes classes: as heurísticas específicas e as gerais.

As heurísticas específicas usam toda a informação que o problema lhes fornece, estando por isso mesmo condicionadas a um pequeno lote de problemas. Para cada novo problema tem que ser elaborada uma nova heurística. No entanto, o seu desempenho é superior às heurísticas de largo espectro uma vez que estas não têm em conta as características específicas de cada problema. Um dos exemplos mais conhecidos deste tipo de heurísticas específicas,

#### 1.4. Metaheurísticas

usada no Problema do Caixeiro Viajante, foi proposto por Lin e Kernighan [LK73] e é a heurística “ $k$ -opt”, executando repetidamente melhoramentos na solução corrente até que a solução final esteja próxima do óptimo. É uma sofisticação da pesquisa local, isto é, quando não for encontrada melhor solução na sua vizinhança o algoritmo pára. O mecanismo usado na pesquisa é a troca múltipla. Foi provado por David Jonhson, Dantzig e Fulkerson [DFJ54] que o melhor mecanismo de transição, para o Problema do Caixeiro Viajante, consiste na troca de dois arcos apenas, isto é, a chamada troca dupla 1.2.

As heurísticas gerais podem ser usadas em todos os problemas, independentemente da sua natureza. Contudo, o seu desempenho na maioria das situações é muito fraco. Uma das primeiras e que se tem destacado pela sua simplicidade de implementação é a pesquisa local. O seu principal problema reside na forte dependência da solução inicial e da estrutura de vizinhança. O seu funcionamento consiste numa pesquisa contínua na vizinhança de uma dada solução até encontrar uma solução com custo menor. Outros métodos têm a raiz comum como é o caso do “*multistart*”, em que a pesquisa local é realizada com várias soluções iniciais.

As metaheurísticas [IK96, Ibr96] conjugam dois ingredientes fundamentais: a boa resposta das heurísticas a problemas de difícil resolução e a inspiração noutros métodos com objectivos semelhantes, embora em contextos muito diferentes. São exemplos os Algoritmos Genéticos, baseados no conceito de selecção natural e na génética, a Pesquisa Tabu [Glo89, Glo90, FW92], baseada no funcionamento da memória ou da forma como se assimila o conhecimento, Sistemas Formigueiros [CDM<sup>+</sup>93], baseados na organização de um formigueiro, as Redes Neurais, baseadas no funcionamento do cérebro e, por último, o Método de Simulação da Têmpera, baseado na têmpera e na formação de cristais, fenómenos bem estudados na Física da Matéria Condensada.

##### 1.4.1 Algoritmos Genéticos

Os Algoritmos Genéticos são metaheurísticas baseadas nos processos de selecção natural e na Génética. Resultam de técnicas de simulação de processos de sistemas naturais necessários à evolução, segundo as ideias de Charles Darwin de sobrevivência e adaptação.

Foram propostos nos anos sessenta e setenta por Holland [Hol75] com o objectivo de construir um modelo rigoroso baseado no processo de selecção natural das espécies e na sua evolução. Na natureza cada espécie precisa de se adaptar a um ambiente complexo, e sempre em mutação, por forma a maximizar a sua capacidade de sobrevivência. O conhecimento

destas espécies é transmitido de geração em geração através de informação que é registada nos cromossomas.

O modelo de Holland simula o algoritmo genético da seguinte forma: o primeiro passo é a representação das soluções admissíveis em termos de uma cadeia de caracteres, cromossomas, constituído por um alfabeto cujos elementos que o compõem são, em Genética, chamados *genes*. Em cada geração, o ajustamento de cada cromossoma à população é medido, os novos cromossomas são obtidos por *reprodução* (*mutação* ou *cruzamento*), transportando desta forma a carga *genética* das soluções que lhe deram origem. Os cromossomas são vulgarmente representados por um alfabeto binário  $\{0, 1\}$ ; desta forma

$$\begin{array}{cc|c} 1010 & 010101 & \searrow \\ 1101 & 111111 & \nearrow \end{array} \quad \begin{array}{cc|c} 1010 & 111111 & \\ 1101 & 010101 & \end{array}$$

dão origem, por um processo de reprodução, a duas novas soluções. As soluções originais são divididas através da escolha de um ponto de cruzamento que separa o cromossoma em dois e as duas novas soluções são obtidas pela colagem da primeira parte do cromossoma com a última do outro cromossoma. Outra forma de obter uma nova solução é por mutação que se processa pela substituição de um *gene*.

$$\begin{array}{ccc} 1010 & 0 & 10101 \\ & \updownarrow & \\ 1010 & 1 & 10101 \end{array}$$

A avaliação de uma solução é feita com base no ambiente onde se insere e é representada através de uma função objectivo. Pretende-se encontrar o melhor cromossoma, aquele cuja adequação ao meio seja a melhor.

Da extensa lista de bibliografia sobre este assunto destacam-se os trabalhos de Holland [Hol92] e David Goldberg [Gol89, GMT92].

No trabalho de Emile Aarts [EAVH90] é feita uma generalização e uma unificação teórica dos Algoritmos Genéticos com a Têmpera Simulada, por forma a criar um método abstracto, de tal forma que qualquer uma das metaheurísticas passa a ser um caso particular.

No entanto um *gene* não é um objecto, é um “pacote de informação”, e é partindo desta ideia que Hiloi [Kar96] revê a transmissão genética à luz da Teoria de Informação. Seria deste modo inevitável que o conceito de Entropia fosse chamado a esta discussão.

#### 1.4. Metaheurísticas

A ideia de construir um modelo para os Algoritmos Genéticos tem originado uma grande quantidade de trabalhos. Saliente-se o grupo do GMD – German National Research Center for Information Technology, onde o trabalho tem sido orientado para que o modelo seja construído com base em conceitos Físicos.

##### 1.4.2 Redes Neurais e Máquinas de Boltzmann

As Redes Neurais ou as Redes Neurais Artificiais são modelos matemáticos inspirados na conexão e no funcionamento dos neurónios. A rede é modelada por um grafo, em que os centros decisores correspondem aos vértices e a ligação entre estes são os arcos. Os conceitos básicos das Redes Neurais são baseados, por um lado, na topologia dos vértices e das conexões entre eles e, por outro, nas funções de transferência relacionadas com as entradas e saídas da informação de cada vértice. Um vértice recebe dados de entrada, executa um conjunto de operações e devolve estes resultados à rede. O interesse recente nestes métodos deve-se sobretudo ao trabalho de Hopfield [HT85] estimulado pelos bons resultados em problemas de diferentes áreas [FB97], como por exemplo o reconhecimento de padrões. Estas redes estão integradas numa área maior chamada Computação Neuronal que estuda modelos computacionais inspirados no cérebro humano. Presentemente a Computação Neuronal atrai muitos estudiosos de diversas áreas, em particular da Inteligência Artificial, com o objectivo de simular de uma forma cada vez mais eficaz o funcionamento do cérebro, usando técnicas de computação paralela massiva.

As Redes Neurais podem ser *treinadas*, no sentido em que é possível reconhecer eventos de diferentes classes usando *algoritmos de aprendizagem* ajustando deste modo as entradas de cada vértice por forma a maximizar o seu desempenho. O processo de optimização nestas redes é visto como uma analogia com a minimização do potencial físico representado como uma função de energia. Estas redes podem ser usadas em diversas áreas que vão desde a Optimização Combinatória [Pot93], até ao reconhecimento de padrões passando por sistemas de aprendizagem.

As Máquinas de Boltzmann podem ser vistas como uma generalização do modelo de Hopfield cuja diferença reside na implementação de restrições como ligações de redes estocásticas. Como no modelo anterior as unidades das Máquinas de Boltzmann tomam valores binários, o estado de cada vértice é “sim” ou “não” e as conexões são bidireccionais. Estas máquinas



usam um mecanismo de transição de estado estocástico enquanto as Redes Neurais usam mecanismos deterministas. Segundo Emile Aarts [AK90] existem três razões fundamentais para estudar o modelo das Máquinas de Boltzmann: uma generalização que permite a aplicação em todos os campos da Computação Neuronal, a simplicidade que permite uma fácil implementação e é suportada por um rigoroso formalismo matemático que dá uma boa descrição das propriedades da convergência da rede e permite a construção de algoritmos de aprendizagem simples e precisos. O modelo matemático das máquinas de Boltzmann tem duas características fundamentais. A primeira, é que podem ser consideradas como um modelo para a implementação paralela da Simulação da Têmpera. A segunda, é a introdução do referido algoritmo no domínio da computação neuronal permitindo a construção de algoritmos de aprendizagem usando conceitos muito simples e propriedades muito interessantes.

O paralelismo é uma característica fundamental dos neuro-modelos. Nestes, o desempenho dos decisores isolados (neurões) é formal e explicitamente definido pelo mecanismo de cooperação/competição que está inserido na própria estrutura da rede. O extenso trabalho de Fiesler [FB97] apresenta uma panorâmica muito interessante sobre esta metaheurística.

Por último a Têmpera Simulada, a mais promissora metaheurística, tem origem na analogia com o processo físico da Têmpera. No início dos anos oitenta, Kirkpatrick, Gelatt e Vecchi introduziram e adaptaram conceitos da Física à Optimização Combinatória obtendo desta forma a Têmpera Simulada.

## Capítulo 2

# Têmpera Simulada

Imagine-se um substância cristalina que é aquecida até ao ponto de fusão. O que acontece à medida que vai sendo gradualmente arrefecida? A substância mantém-se líquida, forma um cristal com muitos defeitos ou um cristal perfeito? Esta é uma das questões fundamentais da Mecânica Estatística [Rei65]. Este processo, onde a temperatura ocupa um lugar de destaque, é conhecido como Têmpera. Muito sucintamente a Têmpera de um sólido consiste na diminuição da energia interna das partículas que o constituem, por outras palavras, as partículas vão ocupando diferentes posições por forma a minimizar a energia. É um processo muito antigo bem conhecido dos homens que trabalham o ferro. De uma forma empírica, olhando apenas as diferentes cores do ferro em arrefecimento, *temperavam-no* obtendo desta forma um material muito mais resistente – o aço.

Numa primeira fase, o sólido é submetido a uma temperatura suficientemente elevada por forma a que o seu ponto de fusão seja atingido. Esta temperatura inicial é chamada *temperatura de fusão* e é um valor característico de cada sólido. Numa segunda fase, o sólido é deixado a esse nível durante um longo período de tempo de modo a que os átomos ocupem determinadas posições e o *equilíbrio térmico* seja atingido. Controlando de forma adequada a temperatura o sólido arrefece e a cada nível de temperatura, o equilíbrio é obtido. Consoante o controlo que se exerce sobre a descida da temperatura, o resultado final pode ser: um *cristal*, com os átomos dispostos segundo uma rede cristalina teórica, se o arrefecimento foi cuidadoso, uma estrutura amorfa, sem qualquer ordem cristalina provocada necessariamente por um arrefecimento rápido ou a não obtenção do equilíbrio a cada nível de temperatura.

Quando os átomos se encontram dispostos segundo uma rede cristalina – a configuração

cristalina – a energia interna é mínima. Diz-se então que o sistema de partículas atingiu o seu *estado elementar*.

No processo da Têmpera, existem duas decisões fundamentais uma vez que condicionam o seu desempenho. A primeira prende-se com a forma como o arrefecimento se processa. A segunda diz respeito ao tempo de permanência em cada nível de temperatura. Este tempo é o necessário para que as partículas constituintes do sólido atinjam o equilíbrio térmico. Com este processo pretende-se apenas minimizar a energia interna de um conjunto de átomos levando-os ao seu estado elementar.

## 2.1 Da Física à Optimização Combinatória

Em 1953, Nicholas Metropolis [MRRT53], do Los Alamos Scientific Laboratory, simulou a obtenção do equilíbrio térmico. Para isso, ele criou um algoritmo que ficou conhecido como algoritmo de Metropolis e implementou-o usando os meios de cálculo da época. Com ele, é possível observar os diferentes estados por que passa o conjunto de átomos até atingir o estado de equilíbrio a um dado valor de temperatura. A altas temperaturas, perto da temperatura de fusão, os átomos têm um grau de liberdade muito grande, podem deslocar-se livremente e ocupar todas as posições atómicas possíveis. À medida que a temperatura vai descendo o grau de liberdade diminui e no final os átomos vão-se consolidar numa rede cristalina teórica, correspondente ao estado elementar ou num outro estado de energia interna próximo.

No início dos anos oitenta, Scott Kirkpatrick e os seus colaboradores C. D. Gelatt e M. P. Vechi [KGV83], dos laboratórios da IBM, aperceberam-se de que o processo da Têmpera era muito semelhante, nos seus objectivos, à resolução de um problema de optimização combinatória. Pretendia-se encontrar uma estratégia para a resolução de problemas de optimização considerados difíceis, nomeadamente para os quais ainda não foi encontrado um algoritmo polinomial. Uns anos depois, Černý [Čer85], de uma forma totalmente independente, chega à mesma conclusão, ficando desta forma ligado à introdução dos conceitos fundamentais da Têmpera Simulada na Optimização Combinatória.

Estes conceitos estabelecem uma forte analogia entre o processo físico da Têmpera de sólidos e a resolução de problemas de Optimização Combinatória de difícil resolução. Nasce assim uma estratégia estocástica com o objectivo de obter boas soluções em problemas da classe NP.

## 2.1. Da Física à Optimização Combinatória

Substituindo os átomos por um conjunto de soluções de um problema de Optimização Combinatória, por exemplo um conjunto de soluções admissíveis para o Problema do Caixeiro Viajante, e interpretando a temperatura como um parâmetro de controlo, tem-se a Têmpera Simulada.

Traduzindo numa pseudo-linguagem, o método da Têmpera Simulada apresenta os seguintes passos.

---

Solução inicial  $s_i$

Temperatura inicial  $T$

repetir

repetir

        gerar solução  $s_j$  vizinha de  $s_i$

se  $\delta = f(s_j) - f(s_i) < 0$

então  $s_i \leftarrow s_j$

senão  $s_i \leftarrow s_j$  com probabilidade  $\exp(-\delta/T)$

até ao equilíbrio

$T \leftarrow \text{Novo}(T)$

até satisfazer critério de paragem

---

A forma como as soluções se comportam é semelhante ao processo físico. A *temperaturas* elevadas o espaço de soluções é percorrido numa maior amplitude. À medida que este parâmetro vai sendo menor o espaço de soluções passa a ser pesquisado em vizinhanças das soluções de menor custo. Pretende-se, no final, obter uma solução mínima global ou, caso não seja possível averiguar a globalidade, uma solução de boa qualidade.

A aplicação deste método exige algumas definições que se dividem em dois grupos. O primeiro grupo diz respeito à especificidade do problema: uma correcta descrição do espaço de soluções  $S$ , um mecanismo de transição adequado e a definição da função custo. O segundo grupo de definições é constituído pelos parâmetros que definem um algoritmo, como sejam: a temperatura inicial  $T$ , a forma de controlar a descida, a caracterização do equilíbrio e o critério de paragem.

Deste último conjunto de definições resultam vários algoritmos para o mesmo método, que se distinguem pela forma como se concretizam esses parâmetros. Este conjunto de definições

é designado por “estratégia de arrefecimento”, realçando desta forma a importância que a temperatura tem em todo o processo. À estratégia de arrefecimento podem ser ainda impostas condições, como se verá no Capítulo 4 deste trabalho, tais como: a adaptabilidade e a geração automática em tempo real.

## 2.2 Da Optimização Combinatória à Física

A Têmpera é o processo físico que conduz um sólido a um estado de energia mínima. A temperatura é elevada e as partículas que o compõem movem-se livremente, à medida que é arrefecido a mobilidade é restringida e um estado de energia mínimo é atingido. Na execução perfeita deste processo a forma cristalina é atingida, ou seja o estado elementar é encontrado. O processo, estudado na Física da Matéria Condensada, é regulado por duas fases fundamentais:

- elevar a temperatura até que o sólido atinja o seu ponto de fusão;
- descer a temperatura controladamente, por forma a que as partículas do sólido se consolidem num estado de energia mínima.

Como foi referido no início deste capítulo, o processo da têmpera foi modelado por Metropolis [MRRT53] com a finalidade de simular a obtenção do equilíbrio térmico a uma dada temperatura. Uma sequência de estados evolui da seguinte forma: dado um estado  $i$  com energia  $E_i$  gera-se através de um mecanismo de perturbação que actua sobre o sistema (alterando por exemplo, a posição de uma partícula), um estado  $j$  com energia  $E_j$ . Se a diferença de energia  $\delta = E_j - E_i$  é menor ou igual a zero então o estado  $j$  é aceite como estado corrente. Caso contrário, o estado  $j$  é aceite mediante a aplicação de um critério estocástico dado por:

$$\exp(-\delta/KT) \tag{2.1}$$

onde,  $T$  é a temperatura e  $K$  é a constante de Boltzmann ( $1.38 \times 10^{-23}$  ergs deg<sup>-1</sup>).

Se o sistema for arrefecido de uma forma adequada o equilíbrio é alcançado a cada nível da temperatura. A sua caracterização é conseguida através da distribuição de Gibbs-Boltzmann, apresentada no início deste século e ainda antes do desenvolvimento da Mecânica Quântica. No livro de J. Willard Gibbs é apresentada pela primeira vez a Distribuição Canónica, ou Distribuição de Gibbs-Boltzmann, como uma função de energia [Gib26, Capítulo IV]. A

## 2.2. Da Optimizaç o Combinat ria   F sica

import ncia desta distribui  o est  bem patente no pref cio de M. Brillouin, onde se pode ler:

[...] *car c'est bien la le carat re de cette oeuvre, v ritable testament scientifique de Gibbs. Elle ouvre une nouvelle  poque dans le d veloppments des th ories physiques.*

A vari vel aleat ria  $X$  representa os diversos estados de um s lido a uma determinada temperatura. A probabilidade do s lido se encontrar no estado  $i$ , com energia  $E_i$    temperatura  $T$ ,   dada por:

$$P(X = i) = \frac{\exp(-E_i/KT)}{Z}, \quad (2.2)$$

onde,

$$Z = \sum_j \exp(-E_j/KT)$$

  a Fun  o de Partilha o.

A analogia deste processo com a T mpera Simulada, usada na resolu  o de problemas de Optimiza  o Combinat ria,   estabelecida da seguinte forma:

- as solu  es dum problema s o equivalentes aos estados num sistema f sico;
- o custo de uma solu  o   equivalente   energia de um estado.

Como no processo f sico da T mpera a temperatura controla o desenrolar do algoritmo, ocupando desta forma um lugar de destaque. A sequ ncia das temperaturas  $\{T_n\}$  obedece a uma rela  o de ordem:

$$T_0 > T_1 > \dots > 0. \quad (2.3)$$

A cada n vel de temperatura   executado o algoritmo de Metropolis. O crit rio de aceita  o   definido da seguinte forma: dadas duas solu  es  $s_i$  e  $s_j \in \mathcal{V}(s_i)$  com custos  $f(s_i)$  e  $f(s_j)$ , respectivamente, a solu  o  $s_j$    aceite se

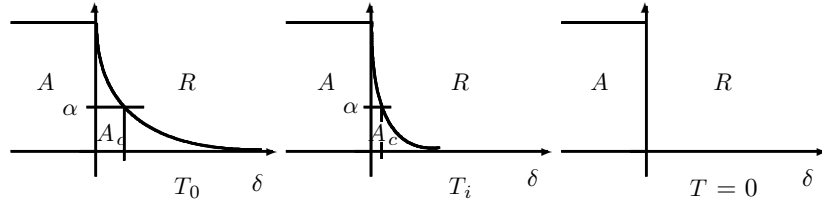
$$P(s_j \text{ aceite}) = \begin{cases} 1 & \text{se } \delta < 0 \\ \exp\left(-\frac{\delta}{T}\right) & \text{se } \delta \geq 0 \end{cases} \quad (2.4)$$

onde  $\delta = f(s_j) - f(s_i)$ .

Uma *transi  o*   o resultado da aplica  o sequencial do mecanismo de gera  o e do crit rio de aceita  o.

A principal característica deste método é a aceitação de soluções cujo valor vai contra o sentido da optimização em curso, e que torna possível sair dos muitos mínimos locais que as funções possuem. Com valores de  $T$  elevados as soluções deste tipo são aceites em maior número, no entanto, quando este valor se aproxima de zero, nenhuma solução deste tipo é aceite.

A probabilidade de aceitação é implementada comparando o valor de  $\exp(-\delta/T)$  com um valor seleccionado aleatoriamente no conjunto  $\alpha \in [\exp(-\delta_{\max}/T), 1]$ . Na figura seguinte estão representadas as áreas de rejeição e aceitação para um conjunto de valores de  $T$ .



Este método pode ser entendido como uma generalização do método da pesquisa local quando o valor de  $T$  se aproxima de zero.

Na secção seguinte apresentam-se as linhas gerais de duas demonstrações da convergência assintótica da Têmpera Simulada para um conjunto de soluções óptimas, usando cadeias de Markov e Autómatos Estocásticos. A terceira demonstração de convergência assintótica diz respeito ao custo das soluções. Prova-se que, quando a temperatura se aproxima de zero é gerado um número infinito de transições, o custo das soluções se aproxima do custo óptimo.

A modelação “clássica” apresentada por Emile Aarts [LA87] tem por base a Teoria dos Processos Estocásticos, mais propriamente as Cadeias de Markov e tem como objectivo final a prova da convergência assintótica do referido método.

Os Autómatos Estocásticos podem ser utilizados como um modelo da Têmpera Simulada. Na Teoria dos Autómatos Estocásticos existe um problema característico: a procura de um valor extremo num espaço finito e discreto. Imagine-se um autómato como uma estrutura mais geral onde um algoritmo estocástico opera, que admite como entrada um vector de parâmetros discretos e como saída um valor resultante de uma função escalar. Este autómato serve de base a um modelo para a Têmpera Simulada e as propriedades dos Autómatos Estocásticos são usadas para demonstrar a convergência não só da Têmpera Simulada, mas

### 2.3. Cadeias de Markov

de todos os Métodos com Capacidade de Tolerância, isto é, métodos que admitem uma degradação da função objectivo como forma de sair de mínimos locais.

Finalmente, é apresentada uma prova de convergência baseada nas Transições. Através de uma caracterização das transições a cada nível de temperatura e à medida que esta decresce, prova-se que o custo das soluções tende assintoticamente para um custo próximo do óptimo.

As duas primeiras demonstrações de convergência necessitam de propriedades das Cadeias de Markov, das quais se apresenta em seguida uma breve síntese. Na maioria dos resultados são omitidas as demonstrações indicando-se no entanto a bibliografia onde estas podem ser encontradas.

## 2.3 Cadeias de Markov

Um processo estocástico [Fel66, Mat90] é uma colecção  $\{X_t, t \in T\}$  de variáveis aleatórias  $X_t$  definidas sobre um espaço de probabilidade e tomando valores em  $E$ , o espaço de estados. Ao conjunto  $T$  chama-se espaço do parâmetro e designa-se por  $X_t$  o estado do processo no instante  $t$ . A caracterização dos diversos processos estocásticos é baseada na natureza do espaço de estados  $E$ , do parâmetro indexado em  $T$  e das relações de dependência entre as variáveis aleatórias  $X_t$ . O conjunto  $E$  pode possuir uma estrutura discreta, por exemplo isomorfa ao conjunto  $\mathbb{N}$ , diz-se, neste caso, que o processo tem espaço de estados discreto. Por outro lado, se  $E = \mathbb{R}$ , então  $X_t$  é um processo estocástico de valores reais. Finalmente, se  $E$  é um espaço euclidiano de dimensão finita, então  $X_t$  é um processo  $k$ -vector, em que  $k$  é um valor referente à dimensão do espaço. A caracterização do espaço do parâmetro  $T$  é realizada da seguinte forma: se  $T$  for numerável, então o processo é de *parâmetro discreto* ou *tempo discreto*. Se  $T$  for contínuo, então o processo é de *parâmetro contínuo* ou *tempo contínuo*. Da relação de dependência das variáveis aleatórias resulta um conjunto muito vasto de processos estocásticos alguns dos quais de extrema importância. No que se segue as variáveis aleatórias são reais e o espaço do parâmetro é dado por  $T = \mathbb{R}_0^+$ .

No processo estocástico  $\{X_t, t \in T\}$ , tomam-se as variáveis aleatórias  $X_{t_2} - X_{t_1}, X_{t_3} - X_{t_2}, \dots, X_{t_n} - X_{t_{n-1}}$  que são independentes, para quaisquer  $t_1, t_2, \dots, t_n \in T$  e se verificarem a relação  $t_1 < t_2 < \dots < t_n$ , diz-se que têm incrementos independentes. Se a distribuição dos incrementos  $X_{t_1+h} - X_{t_1}$  depender unicamente da amplitude  $h$  do intervalo  $[t_1, t_1 + h]$  e não do instante  $t_1$ , diz-se que o processo tem incrementos estacionários. Em particular, no caso



de um espaço de parâmetro discreto,  $T = \mathbb{N}_0$ , o processo  $\{X_n, n \in \mathbb{N}_0\}$  com incrementos independentes *reduz-se* a uma sucessão de variáveis aleatórias independentes

$$Z_0 = X_0, Z_i = X_i - X_{i-1} \quad (i = 1, 2, \dots).$$

Conhecida a distribuição de cada  $Z_i$  ( $i = 1, 2, 3, \dots$ ), é possível determinar a distribuição conjunta de um qualquer número finito de variáveis aleatórias uma vez que  $X_i = Z_0 + Z_1 + \dots + Z_i$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots$

Um processo estocástico  $\{X_t, t \in T\}$  diz-se estritamente estacionário se, para qualquer  $h > 0$  e qualquer selecção  $t_i \in T : t_i + h \in T$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , as famílias de variáveis aleatórias

$$\{X_{t_1+h}, X_{t_2+h}, \dots, X_{t_n+h}\} \text{ e } \{X_{t_1}, X_{t_2}, \dots, X_{t_n}\}$$

têm a mesma função distribuição. Esta condição identifica o estado de equilíbrio estatístico de um processo.

Um processo  $\{X_t, t \in T\}$  diz-se de Markov se

$$P(a \leq X_t \leq b | X_{t_1} = x_1, X_{t_2} = x_2, \dots, X_{t_n} = x_n) = P(a \leq X_t \leq b | X_{t_n} = x_n)$$

sempre que  $t_1 < t_2 < \dots < t_n < t$ . A probabilidade de ocorrência de qualquer acontecimento relativo ao comportamento futuro do processo, dado que o estado presente é conhecido, não é alterado pelo comportamento passado. Se as realizações são funções contínuas, então trata-se de um processo de difusão. A um processo de Markov cujo espaço de estados é finito ou infinito numerável chama-se Cadeia de Markov.

Formalmente,  $\{X_n, n \in \mathbb{N}_0\}$  é uma cadeia de Markov se

$$P(X_{n+1} = j | X_0, X_1, \dots, X_n = i) = P(X_{n+1} = j | X_n = i), \forall j \in E, \forall n \in \mathbb{N}_0; \quad (2.5)$$

e deste modo

$$p_{ij}^{n,n+1} = P(X_{n+1} = j | X_n = i). \quad (2.6)$$

Se estas probabilidades forem independentes de  $n$  (geralmente dependem do estado inicial, do estado final e do instante  $n$ ), então a cadeia de Markov é homogénea no tempo. Deste modo,

$$p_{ij} = P(X_{n+1} = j | X_n = i), \quad \forall n \in \mathbb{N}_0 \quad (2.7)$$

é a probabilidade de alcançar o estado  $j$  numa só transição partindo do estado  $i$  e designa-se por *probabilidade de transição*. A representação para todos os estados é feita através de uma

### 2.3. Cadeias de Markov

matriz  $P$  das probabilidades de transição da cadeia. Se o número de estados for finito, a matriz  $P$  é quadrada e a ordem é igual ao número de estados. Esta matriz satisfaz as duas condições seguintes:  $p_{ij} \geq 0$ ,  $\forall i, j = 0, 1, 2, \dots$  e  $\sum_{j=0}^{\infty} p_{ij} = 1$ ,  $\forall i = 0, 1, 2, \dots$ , e chama-se *matriz estocástica*.

**Teorema 2.1** *Dada uma cadeia de Markov homogénea, verifica-se que*

$$P(X_{n+1} = i_1, X_{n+2} = i_2, \dots, X_{n+m} = i_m | X_n = i_0) = p_{i_0 i_1} p_{i_1 i_2} \dots p_{i_{m-1} i_m},$$

para quaisquer  $n, m \in \mathbb{N}_0$ ,  $m \geq 1$  e  $i_0, i_1, \dots, i_m \in E$ .

A demonstração deste resultado é imediata, atendendo às definições de probabilidade condicionada (2.5) e (2.7). Um resultado imediato é dado pelo seguinte corolário.

**Corolário 2.1** *Se  $P(X_0 = i) = a(i)$ ,  $i \in E$  então*

$$P(X_0 = i_0, X_1 = i_1, \dots, X_m = i_m) = a(i_0) p_{i_0 i_1} p_{i_1 i_2} \dots p_{i_{m-1} i_m}$$

para quaisquer  $m \in \mathbb{N}_0$  e  $i_0, i_1, \dots, i_m \in E$ .

Numa cadeia de Markov homogénea, as probabilidades de alcançar o estado  $j$  em  $n$  transições, partindo do estado  $i$ ,  $p_{ij}^n = P(X_{n+m} = j | X_m = i)$ ,  $i, j, n, m \in \mathbb{N}_0$ , são independentes de  $m$  e calculam-se por intermédio das probabilidades  $p_{ij}$ .

**Teorema 2.2** *A equação de Chapman–Kolmogorov de uma cadeia de Markov com matriz de probabilidades de transição  $P = [p_{ij}]$  é dada por:*

$$p_{ij}^{m+n} = \sum_{k=0}^{\infty} p_{ik}^n p_{kj}^m, \quad i, j = 0, 1, 2, \dots \quad (2.8)$$

onde,  $m, n \in \mathbb{N}_0$  e

$$p_{ij}^0 = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases}.$$

De acordo com esta equação  $P^{(n+m)} = P^{(n)} P^{(m)}$ , e  $P^{(n)} = P P^{(n-1)} = P P P^{(n-2)} = P^n$ .

Um estado  $j$  é *acessível* a partir do estado  $i$  se  $p_{ij}^n > 0$  para algum inteiro  $n \geq 0$ , isto é, partindo de  $i$ , existe uma probabilidade positiva de  $j$  ser alcançado num número finito de transições. Dois estados *comunicam* quando são acessíveis a partir um do outro. De acordo

com esta relação de comunicabilidade, que se prova ser de equivalência, é possível dividir-se os estados em classes de equivalência. Se todos os estados comunicam entre si, a cadeia de Markov diz-se *irredutível* e a relação de equivalência induz uma só classe. O *período* de um estado  $i$ ,  $d(i)$ , é máximo divisor comum de todos os inteiros  $n \geq 1$  para os quais  $p_{ii}^n > 0$  (no caso particular em que  $p_{ii}^n = 0$  para todos os  $n \geq 1$ , toma-se  $d(i) = 0$ ); se  $i$  comunica com  $k$ , então  $d(i) = d(k)$  e se o estado  $i$  tiver período  $d(i)$ , então existe um inteiro  $N$  e para todos os inteiros  $n \geq N$ , a probabilidade de partindo de  $i$  regressar a  $i$  é dada por  $p_{ii}^{nd(i)} > 0$ . Quando todos os estados têm período unitário a cadeia de Markov chama-se aperiódica.

A *probabilidade de primeira visita*, isto é, partindo de  $i$  a primeira visita ao estado  $i$  ocorrer exactamente na transição de ordem  $n$ , é dada por

$$f_{ii}^n = P(X_n = i, X_k \neq i \text{ } k = 1, 2, \dots, n-1 | X_0 = i) \text{ , } n \geq 1,$$

com  $f_{ii}^0 = 0$  e  $f_{ii}^1 = p_{ii}^1$ .

**Teorema 2.3** [Fel66] *As probabilidades  $p_{ii}^n, i \in E, n \in \mathbb{N}$  podem ser calculadas em termos das probabilidades de primeira visita usando a expressão*

$$p_{ii}^n = \sum_{k=0}^n f_{ii}^k p_{ii}^{n-k} \text{ , } n \geq 1.$$

**Definição 2.1** *Um estado diz-se recorrente se e só se  $\sum_{n=1}^{\infty} f_{ii}^n = 1$  ( $\sum_{n=1}^{\infty} p_{ii}^n = \infty$ ), isto é, partindo do estado  $i$  regressar de certeza a  $i$  após um número finito de transições.*

**Definição 2.2** *Um estado diz-se transitório se e só se  $\sum_{n=1}^{\infty} f_{ii}^n < 1$ , isto é, partindo do estado  $i$  existe uma probabilidade positiva de não regressar a  $i$ .*

Se  $i$  comunica com  $j$  e  $j$  é recorrente, então  $i$  também é recorrente. Se  $j$  é um estado recorrente e  $j$  é acessível a  $k$ , então  $k$  também é acessível a  $j$  e  $f_{jk} = \sum_{n=1}^{\infty} f_{jk}^n = 1$ .

O teorema limite do renovamento permite calcular  $\lim_{n \rightarrow \infty} p_{ij}^n$ , ou seja, o comportamento limite da cadeia de Markov [Fel66].

**Teorema 2.4** [Mat90] *Considerem-se as sucessões reais  $\{a_k\}$ ,  $\{u_k\}$ ,  $\{b_k\}$  com  $k \in \mathbb{Z}$ , e suponha-se que:  $a_k \geq 0$ ,  $\sum a_k = 1$ ,  $\sum |k|a_k < \infty$ ,  $\sum ka_k > 0$  e  $\sum |b_k| < \infty$ ; o m.d.c. dos inteiros  $k$  para os quais  $a_k > 0$  é 1. Se existe uma sucessão limitada de números reais,  $\{u_n\}$ , para os quais*

$$u_n - \sum_{k=-\infty}^{+\infty} a_{n-k} u_k = b_n$$

### 2.3. Cadeias de Markov

chamada equação de renovamento, então existe o  $\lim_{n \rightarrow +\infty} u_n$  e  $\lim_{n \rightarrow -\infty} u_n$ . Se  $\lim_{n \rightarrow -\infty} u_n = 0$ , então,

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} u_n = \frac{\sum_{k=-\infty}^{\infty} b_k}{\sum_{k=-\infty}^{\infty} k a_k}.$$

Se se verificar que  $\sum_{k=-\infty}^{+\infty} k a_k = \infty$ , as relações limite são válidas, desde que

$$\frac{\sum_{k=-\infty}^{+\infty} b_k}{\sum_{k=-\infty}^{+\infty} k a_k} = 0.$$

No caso em que  $\{a_k\}$ ,  $\{u_k\}$  e  $\{b_k\}$  são nulas para  $k < 0$  e  $b_k \geq 0$  para  $k > 0$ , a equação de renovamento é dada por,

$$u_n - \sum_{k=0}^n a_{n-k} u_k = b_n \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

O comportamento de  $p_{ij}^n$  quando  $n \rightarrow \infty$ , para qualquer  $i, j \in E$ , é um caso particular do teorema anterior conhecido como o teorema Ergódico das Cadeias de Markov.

**Teorema 2.5** [Fel66] *Se uma cadeia de Markov for irredutível, aperiódica e todos os estados forem recorrentes, usando as definições anteriores de  $p_{ii}^n$ ,  $f_{ii}^n$  e sabendo que*

$$p_{ii}^n - \sum_{k=0}^n f_{ii}^{n-k} p_{ii}^k = \begin{cases} 1 & \text{se } n = 0 \\ 0 & \text{se } n > 0 \end{cases}$$

então  $\lim_{n \rightarrow \infty} p_{ii}^n = \frac{1}{\sum_{n=0}^{\infty} n f_{ii}^n}$  e  $\lim_{n \rightarrow \infty} p_{ji}^n = \lim_{n \rightarrow \infty} p_{ii}^n$ .

No caso de a cadeia de Markov não ser irredutível, o teorema pode mesmo assim ser aplicado a submatrizes da matriz das probabilidades de transição desde que as condições iniciais sejam verificadas.

Quando um estado  $i$  pertence a uma classe recorrente e aperiódica, então

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{r=1}^n p_{ii}^r = \frac{1}{\sum_{n=1}^{\infty} n f_{ii}^n} = \frac{1}{m_i} \quad (2.9)$$

onde  $m_i$  é o tempo médio de recorrência do estado  $i$ . No caso em que o estado  $i$  pertence a uma classe recorrente, periódica de período  $d$ , então  $p_{ii}^m = 0$  se  $m \neq nd$ ,  $\forall n \in \mathbb{N}$  e  $\lim_{n \rightarrow \infty} p_{ii}^n = \frac{d}{m_i}$ .

Quando um estado  $i$  pertence a uma classe recorrente, então

$$\lim_{n \rightarrow \infty} p_{ii}^{nd} = \pi_i \quad (2.10)$$

onde  $\pi_i$  é a chamada *probabilidade limite* do estado  $i$ . Um estado diz-se *recorrente positivo* ou *ergódico* se  $\pi_i > 0$  ou *recorrente nulo* se  $\pi_i = 0$ .

Numa cadeia de Markov irredutível todos os estados são do mesmo tipo (recorrentes positivos, recorrentes nulos ou transitórios) e além disso têm o mesmo período. Se os estados forem em número finito a cadeia não pode ter estados recorrentes nulos. Uma cadeia de Markov com um número finito de estados não pode ter só estados transitórios.

Se algumas propriedades dos estados da cadeia forem verificadas, o cálculo da probabilidade limite pode ser simplificado.

**Teorema 2.6** *Numa cadeia de Markov homogénea, irredutível e aperiódica, todos os estados são recorrentes positivos se e só se o sistema de equações lineares*

$$\begin{cases} \pi_j = \sum_{i \in E} \pi_i p_{ij}, & j = 0, 1, 2, \dots \\ \sum_{i \in E} \pi_i = 1 \end{cases} \quad (2.11)$$

*for possível e determinado.*

**Corolário 2.2** *Numa cadeia de Markov homogénea, irredutível, aperiódica e com um número finito de estados, a distribuição de probabilidade estacionária existe e é dada pela solução,  $\pi_j = \lim_{n \rightarrow \infty} p_{ij}^n$ , única e estritamente positiva, do sistema 2.11.*

À distribuição estacionária chama-se também distribuição invariante ou de equilíbrio; se  $[\pi_0, \pi_1, \dots]$  for a distribuição inicial, ou seja,  $P(X_0 = j) = \pi_j$ ,  $j = 0, 1, 2, \dots$ , então  $P(X_n = j) = \sum_{i \in E} P(X_0 = i) p_{ij}^n = \sum_{i \in E} \pi_i p_{ij}^n = \pi_j$ ,  $j = 0, 1, 2, \dots$ . Neste caso, as variáveis aleatórias  $X_0, X_1, \dots, X_n$  têm a mesma distribuição de probabilidade e a cadeia é estritamente estacionária.

Estes são os resultados essenciais para traçar as linhas gerais da demonstração clássica da Têmpera Simulada.

## 2.4 Modelo “clássico” da Têmpera

O modelo que se apresenta foi proposto por E. Aarts [LA87] em *Simulated Annealing: Theory and Applications* e tem por base a descrição das transições através de cadeias de Markov. Prova-se, usando propriedades das cadeias de Markov, que em determinadas condições o método converge para um conjunto de soluções óptimas  $S_{opt}$ .

Seja  $X_k$  a variável aleatória que representa a configuração obtida ao fim de  $k$  transições. Deste modo, a probabilidade de obter uma solução  $i$  após  $k$  transições é dada por

$$a_i(k) = \sum_{r \in S} a_r(k-1) p_{ri}^{k-1,k} \quad , \quad k = 1, \dots$$

Pela definição de probabilidade de transição,  $p_{ij}^{k-1,k} = P(X_k = j | X_{k-1} = i)$  e  $a_i(k) = P(X_k = i)$ .

Para uma temperatura constante a cadeia de Markov correspondente é homogénea e a matriz de probabilidade de transição é dada por:

$$p_{ij}(T) = \begin{cases} g_{ij}(T) a_{ij}(T) & i \neq j \\ 1 - \sum_{r=1, r \neq i}^{|S|} g_{ir}(T) a_{ir}(T) & i = j \end{cases} \quad (2.12)$$

onde  $g_{ij}(T)$  são as probabilidades de geração e  $a_{ij}(T)$  são as probabilidades de aceitação. Estas probabilidades formam as matrizes  $G(T)$  e  $A(T)$ , de geração e de aceitação respectivamente.

Pretende-se que a probabilidade de se obter uma solução óptima, após um número  $m$  de transições, seja dada por

$$P(x_m \in S_{opt}) = 1. \quad (2.13)$$

Na impossibilidade de calcular esta probabilidade surge, como alternativa, a demonstração da convergência assintótica, isto é,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} P(x_k \in S_{opt}) = 1. \quad (2.14)$$

Relacionado com o decréscimo da temperatura existem duas formulações distintas do algoritmo. O algoritmo homogéneo é descrito por uma sequência de Cadeias de Markov homogéneas, cada uma gerada a um nível de temperatura. O algoritmo não-homogéneo é descrito por uma única Cadeia de Markov não-homogénea, onde temperatura decresce em cada transição.

Em seguida, apresentam-se os aspectos mais importantes da demonstração referente ao algoritmo homogêneo, que se encontra na sua versão integral em [LA87]. A ideia principal da demonstração consiste na imposição de algumas condições às matrizes  $A(T)$  e  $G(T)$  de dimensão infinita e na verificação de que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} T_k = 0. \quad (2.15)$$

A distribuição estacionária é definida por um vector estocástico cuja  $i$ -ésima componente para um estado  $j$  arbitrário é dada por:

$$q_i = \lim_{k \rightarrow \infty} P(X_k = i | X_0 = j). \quad (2.16)$$

Desta condição resulta que:

$$q_i = \lim_{k \rightarrow \infty} P(X_k = i) = \lim_{k \rightarrow \infty} a_i(0)^T P^k, \quad (2.17)$$

onde  $a_i(0)$  é a distribuição de probabilidade inicial e  $P$  é uma matriz estocástica.

A prova da convergência assenta em duas condições fundamentais. A primeira consiste em impôr condições às matrizes  $A(T)$  e  $G(T)$  para que a distribuição estacionária  $q(T)$  exista. A segunda consiste em adaptar e refinar estas condições por forma a que, com a descida de  $T$ , a distribuição estacionária  $q(T)$  convirja para uma distribuição uniforme no conjunto de soluções óptimas, isto é,

$$\lim_{T \rightarrow 0} q(T) = \pi, \quad (2.18)$$

onde

$$\pi_i = \begin{cases} |S_{opt}|^{-1} & i \in S_{opt} \\ 0 & \text{outros casos} \end{cases}. \quad (2.19)$$

Combinando as equações (2.17) e (2.18) tem-se que

$$\lim_{T \rightarrow 0} \left( \lim_{k \rightarrow \infty} P(X_k = i) \right) = \pi_i, \quad (2.20)$$

onde  $\pi_i$  é dado pela expressão (2.19). A demonstração estará completa se for garantida a existência da distribuição estacionária e a sua convergência assintótica,

$$\lim_{T \rightarrow 0} \left( \lim_{k \rightarrow \infty} P(x_k \in S_{opt}) \right) = 1. \quad (2.21)$$

## 2.4. Modelo “clássico” da Têmpera

### 2.4.1 Existência e Convergência da Distribuição Estacionária

A distribuição estacionária de uma cadeia de Markov existe se esta for finita, homogénea, irredutível e aperiódica. Para além de coincidir com a distribuição limite, pode também ser determinada pelo seguinte sistema:

$$\forall i : q_i = \sum_j q_j p_{ji} \text{ e } \sum_i q_i = 1, \quad (2.22)$$

cujas soluções são únicas.

Em relação aos algoritmos, estas propriedades, traduzem-se do seguinte modo:

- o facto da cadeia ser irredutível garante que existe uma probabilidade positiva de, partindo de qualquer solução, qualquer outra poder ser obtida num número finito de transições;
- o facto da cadeia ser aperiódica, garante que partindo de uma qualquer solução, existe uma probabilidade positiva de voltar a essa solução num número finito de transições.

Se  $\forall i, j, T > 0 : a_{ij}(T) > 0$  é a distribuição estacionária, então  $g_{ij}(T)$  também é estacionária. Formalmente,  $\forall i, j \in S \exists r_0, r_1, \dots, r_p \in S$  onde  $r_0 = i$  e  $r_p = j$ , tal que

$$g_{r_k r_{k+1}}(T) > 0, k = 0, 1, \dots, p-1. \quad (2.23)$$

É suficiente, para que a cadeia de Markov seja aperiódica [RSV91], que a seguinte relação seja verificada:

$$\forall T > 0 \forall i_r, j_r \in S : a_{i_r j_r} < 1 \wedge g_{i_r j_r} > 0. \quad (2.24)$$

Na formulação original da Têmpera Simulada [KGV83, Cér85], a probabilidade de aceitação é dada por  $a_{ij}(T) = \min\{1, \exp(-\delta/T)\}$ . A expressão (2.24) continua a ser satisfeita, para todo  $T > 0$ ,  $i \in S_{opt}$  e  $j \notin S_{opt}$ .

A demonstração feita por Romeo e Sangiovanni-Vincentelli [RSV91] é baseada no facto de que para qualquer solução  $s_i \in S$  a  $i$ -ésima componente da distribuição estacionária ser dada por

$$q_i(T) = \frac{\Psi(s_i, T)}{\sum_j \Psi(f(s_j), T)}, \quad (2.25)$$

onde  $\Psi(\alpha, T)$  é uma função que satisfaz as condições:

$$\forall s_i \in S, T > 0 : \Psi(s_i, t) > 0 \quad (2.26)$$



e

$$\sum_{i=1, i \neq j}^{|S|} \Psi(s_i, T) g_{ij}(T) a_{ij}(T) = \Psi(s_i, T) \sum_{i=1, i \neq j}^{|S|} g_{ij}(T) a_{ij}(T). \quad (2.27)$$

Para garantir que  $\lim_{T \rightarrow 0} q(T) = \pi$ , são suficientes as seguintes restrições sobre a função  $\Psi(\alpha, T)$ :

$$\lim_{T \rightarrow 0} \Psi(\alpha, T) = \begin{cases} 0 & \alpha > 0 \\ \infty & \alpha < 0, \end{cases} \quad (2.28)$$

$$\frac{\Psi(\alpha_1, T)}{\Psi(\alpha_2, T)} = \Psi(\alpha_1 - \alpha_2, T), \quad (2.29)$$

e

$$\forall T > 0 : \Psi(0, T) = 1. \quad (2.30)$$

É difícil construir uma forma explícita para a distribuição estacionária usando as equações (2.25)–(2.30). Por esta razão um grande número de autores escolhe a função  $\Psi(\alpha, T)$ , que traduz de uma forma explícita as condições de existência para os vectores  $q(T)$  com um número menor de restrições sobre as matrizes  $A(T)$  e  $G(T)$ . Alguns autores, como Aarts, Van Laarhoven, Lundy e Mess, formulam esta escolha substituindo  $\Psi(f(j) - f_{opt}, T)$  por  $a_{i_0 i}(T)$ ,  $\forall i_0 \in S_{opt}$  e  $G(T)$  independente de  $T$ .

Na formulação original proposta por Kirkpatrick e Černý [KGV83], a cadeia de Markov associada a  $A(T)$  e  $G(T)$  é irredutível, aperiódica e a distribuição estacionária é dada por

$$q_i(T) = \frac{\exp(-(f(i) - f_{opt})/T)}{\sum_{j \in S} \exp(-(f(j) - f_{opt})/T)}. \quad (2.31)$$

As condições que foram sendo impostas são apenas suficientes. Existem formulações para a aceitação e a geração que não satisfazem estas condições e no entanto a distribuição estacionária ainda existe, como no exemplo proposto por Aarts e Krost [LA87], onde a matriz de aceitação é dada por

$$a_{ij}(T) = \left(1 + \frac{\exp(-(f(i) - f_{opt}))}{T}\right)^{-1} \quad (2.32)$$

e não satisfaz a primeira nem a segunda condições, mas conduz à distribuição estacionária dada pela equação (2.31).

As linhas gerais da demonstração no caso do algoritmo homogéneo foram traçadas. Quanto ao algoritmo não homogéneo são impostas condições semelhantes ao caso anterior e, além disso, sob certas condições impostas à matriz  $A(T_k)$ , a razão de convergência da sequência  $\{T_k\}$  não dever ser maior que  $\mathcal{O}(|\log k|^{-1})$ .

## 2.5. Autómatos Estocásticos

A cadeia de Markov não-homogénea é definida por:

$$p_{ij}^{k,k+1}(T) = \begin{cases} g_{ij}(T_k)a_{ij}(T_k) & i \neq j \\ 1 - \sum_{r=1, r \neq i}^{|S|} g_{ir}(T_k)a_{ir}(T_k) & i = j \end{cases}. \quad (2.33)$$

As restrições são agora impostas sobre a sucessão  $\{T_k\}$ ,  $k = 0, 1, \dots$ , onde os valores da temperatura devem obedecer às duas condições:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} T_k = 0$$

e

$$T_k \geq T_{k+1}, \quad k = 0, 1, \dots$$

Não é excluída a hipótese de  $T_k$  se manter constante durante um determinado número de transições, sendo que a cadeia de Markov é homogénea de dimensão finita. A demonstração destes resultados foram apresentadas por P. Laarhoven e E. Aarts [LA87].

## 2.5 Autómatos Estocásticos

O conceito de Autómato Estocástico surgiu na década de sessenta no âmbito do Controlo Adaptativo e, posteriormente, foi-se estendendo a outras áreas entre as quais a Optimização Combinatória [SL90].

**Definição 2.3** *Um autómato estocástico é definido por um sêxtuplo*

$$\{Y, A, X, \pi, \mu, a_1\}$$

onde  $Y$  é o conjunto de entrada,  $A = \{a_1, a_2, \dots, a_s\}$  é o conjunto de estados internos,  $X = \{x_1, x_2, \dots, x_b\}$  é o conjunto de saída,  $\pi$  é uma aplicação  $\pi : A \times Y \rightarrow A$  que representa o estado do autómato para cada estado interno e entrada,  $\mu$  é uma aplicação  $\mu : A \times Y \rightarrow X$  que é a acção associada a cada estado interno e entrada, e  $a_1$  é o estado inicial do autómato.

Um problema de optimização pode ser interpretado como uma estrutura maior, onde um algoritmo estocástico opera. Como entrada, tem-se um vector de parâmetros  $x$ , discretos e definidos no domínio  $S$  dos objectos combinatórios, e, à saída, tem-se um valor dado por uma função escalar  $f(x)$ .

Na teoria geral de autómatos com capacidade de aprendizagem a função  $f$  não é necessariamente conhecida, sendo o problema definido como a procura de um valor extremo em  $S$ . Este problema é idêntico à formulação de um problema de Optimização Combinatória com a seguinte diferença: a função  $f$  é definida apenas pelas suas realizações no primeiro caso, e é definida analiticamente no segundo. No entanto, em ambos os casos, pretende-se identificar uma solução óptima  $x^*$ .

Quando a formulação analítica da função não é conhecida, o problema pode ser resolvido por uma das seguintes técnicas:

- por identificação da função objectivo e resolvendo o correspondente problema de Programação Inteira;
- por pesquisa sobre um conjunto de estados  $\{x_1, x_2, \dots\}$  formado pela sucessiva execução do algoritmo, garantindo em seguida que os estados convergem para um estado óptimo  $x^*$ ;
- por combinação das duas técnicas anteriores. O método que resulta chama-se Método de Extrapolação.

Quando a função objectivo é conhecida, o conjunto de alternativas é quase o mesmo. Considere-se então a segunda alternativa, a técnica de pesquisa.

Uma estratégia estocástica destinada a encontrar um valor óptimo pode ser considerada como um autómato estocástico, que no passo  $n$  do processo de pesquisa é caracterizado pela análise dos valores da função objectivo para os estados  $x_n^1, x_n^2, \dots, x_n^k$ , seleccionados aleatoriamente da vizinhança do estado  $x_{n-1}$  de acordo com um certo critério. Assim, a informação recolhida é usada para produzir um novo estado do sistema com base no anterior, isto é,  $x_{n+1} = G(M_n, x_n^1, x_n^2, \dots, x_n^k)$ , onde  $M_n$  é o vector memória que descreve a história da pesquisa e  $G$  é uma função que descreve o funcionamento do autómato. Se  $M_n = 0$  para qualquer  $n$ , então o algoritmo de pesquisa é sem memória.

### 2.5.1 Classificação dos Autómatos Estocásticos

Partindo da definição 2.3 pode ser observado um conjunto de propriedades.

**Propriedade 2.1** *Se ambas as aplicações forem deterministas, o autómato resultante é determinista.*

## 2.5. Autómatos Estocásticos

**Propriedade 2.2** *Se uma destas aplicações, ou ambas, forem estocásticas, então o autómato é estocástico.*

Desta última propriedade resulta uma classificação para os autómatos segundo as características das aplicações que estão envolvidas. Um autómato com aplicações  $\mu$  determinista e  $\pi$  estocástico é conhecido como *tipo-G*. Um autómato *tipo-H* tem uma aplicação estocástica  $\mu$  e uma aplicação determinista  $\pi$ . Quando ambas as aplicações são estocásticas o autómato é *tipo-GH*, ou simplesmente autómato estocástico.

Se a aplicação estocástica  $\mu : A \rightarrow X$  é independente da acção  $Y$ , então o autómato é chamado *Tipo-GH<sup>+</sup>*. O tipo de entrada define mais algumas características. Um autómato com função de entrada binária é *Modelo-P*; se a entrada é uma colecção finita de objectos o autómato é denominado *Modelo-Q*; se a entrada é um intervalo  $[0, 1]$ , então o autómato é *Modelo-S*.

A optimização de uma função pode ser interpretada como um problema *Modelo-S* que pode ser resolvido por algoritmos desenvolvidos para problemas *Modelo-P* se a função objectivo for limitada.

Por último, se as matrizes de transição  $[\pi_n^{ij}(y)]$  e de acção  $[\mu_n^{ik}(y)]$  forem invariantes no tempo, então o autómato tem uma estrutura constante. Caso contrário, o autómato tem uma estrutura variável.

### 2.5.2 Autómatos Estocásticos Modelos P e S

Para um autómato *Modelo-P*, a variável de entrada  $y$  pode tomar somente dois valores: 0 e 1. Assim,  $\delta_k = f(j) - f(i)$  representa a diferença do valor da função objectivo na transição  $k$ , e

$$y = \begin{cases} 0 & \delta_k < 0 \\ 1 & \delta_k > 0 \text{ (penalização)}. \end{cases}$$

As alterações de estados no autómato como resposta à entrada  $Y$ , são descritas pela matriz de transição. No caso de um autómato determinista, cada linha é composta apenas por um elemento igual a 1 e os restantes iguais a 0. A matriz de transição de um autómato estocástico é a probabilidade da transição do estado  $i$  para o estado  $j$  como resposta a um valor da variável de entrada  $Y$ . O autómato determinista é um caso particular de um autómato estocástico.

A probabilidade de gerar uma penalização como resultado de uma acção  $x_i$  é denotada por  $c_i$  ( $i = 1 \dots, r$ ) e chamada probabilidade de penalização. Assim, a probabilidade de transição  $p_{ij}$ , do estado  $a_i$  para o estado  $a_j$ , de um autómato Modelo-P, é dada por:

$$p_{ij} = c_i p_{ij}(1) + (1 - c_i) p_{ij}(0).$$

A matriz de transição composta pelos  $p_{ij}$  é estocástica e pode ser representada através de uma cadeia de Markov.

Se esta cadeia for ergódica, as probabilidades de equilíbrio ou estacionárias são calculadas resolvendo o seguinte sistema:

$$\begin{cases} wP = w \\ \sum_{i=1}^s w_i = 1 \end{cases} \quad (2.34)$$

Se  $g_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, r$  é a probabilidade da acção  $x_k$  do autómato, e  $G$  é o vector composto pelas probabilidades de acção de todos os estados, então a esperança matemática das penalizações é dada por:

$$E(G, C) = \sum_{i=1}^b g_i c_i.$$

Se as acções são tomadas aleatoriamente com igual probabilidade, então a esperança matemática é dada por:

$$E_0(G, C) = \frac{1}{b} \sum_{i=1}^b c_i.$$

Se  $E(G, C) < E_0(G, C)$ , então o autómato é expedito. Se a média de perda é mínima, então o autómato é óptimo,

$$E(G, C) = c^*, \quad c^* = \min_i \{c_i\}.$$

Se a média de perda é limitada por  $c^* + \epsilon$ , onde  $\epsilon > 0$ ,  $E(G, C) = c^* + \epsilon$ , então o autómato é  $\epsilon$ -óptimo.

Um autómato estocástico cujas probabilidades de acção mudam com o tempo é absolutamente expedito, se a média satisfizer a seguinte condição:

$$E(G(n+1), C) < E(G(n), C) \quad n = 1, 2, \dots$$

Um autómato estocástico é assintoticamente óptimo se:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E(G(n), C) = c^*.$$

## 2.5. Autómatos Estocásticos

Os *algoritmos autómatos* são usados no controlo adaptativo e baseados na condição de que as probabilidades do processo não são conhecidas *a priori*. Um conhecimento antecipado das probabilidades de penalização  $c_1, c_2, \dots, c_b$  permite construir um autómato tendo somente estados e acções com uma probabilidade máxima de penalização  $c_{\max}$ . Esta consideração é muito interessante para problemas de optimização cuja função objectivo é bem definida. Um problema de minimização de uma função  $f$  pode ser descrito convenientemente por um autómato Tipo-S. Como vimos anteriormente, problemas Modelo-S podem ser resolvidos por métodos desenvolvidos para problemas Modelo-P se a função objectivo for limitada.

Os algoritmos baseados em Métodos com Capacidade de Tolerância geram um conjunto de soluções com a particularidade de aceitar algumas cujo valor da função objectivo é superior ao valor da solução corrente. A decisão de “subir” é baseada num determinado critério estocástico. A questão fulcral é saber se estes métodos podem ser descritos por um autómato e que tipo de autómato este método representa.

**Teorema 2.7** *Um Método com Capacidade de Tolerância é um autómato estocástico Tipo-GH Modelo-S com estrutura variável.*

**Demonstração:** Tomam-se como estados internos do autómato  $A = \{a_0, a_1, \dots, a_N\}$  as soluções do problema de optimização. O conjunto de acções  $x_i$ , contido em  $A$ , é determinado pelo conjunto de vizinhos de cada solução  $a_i$ . A aplicação  $\pi$  produz o estado associado a cada entrada e estado anterior. Esta aplicação é definida por duas matrizes:

- $P_0 = [p_{ij}^0]$  é constituída pelas probabilidades de transição do estado  $i$  para  $j$ , quando  $\delta_k \leq 0$ ;
- $P_1 = [p_{ij}^1]$  é constituída pelas probabilidades de transição, quando  $\delta_k > 0$ .

De acordo com a descrição de um Método com Capacidade de Tolerância e pela definição de autómato, cada elemento da linha  $i$  da matriz  $P_0$  é dado por:

$$p_{ij}^0 = \begin{cases} \frac{1}{|A_i|} & j \in A_i \\ 0 & j \notin A_i \end{cases}. \quad (2.35)$$

A matriz  $P_1$  é definida da seguinte forma:

$$p_{ij}^1 = \begin{cases} \frac{P(\text{aceitar } j)}{|A_i|} & j \in A_i, i \neq j \\ 1 - \sum_{m=1, m \neq i} \frac{P(\text{aceitar } m)}{|A_i|} & i = j \\ 0 & j \notin A_i \end{cases}. \quad (2.36)$$

A primeira matriz  $P_0$  é determinista e a segunda  $P_1$  é estocástica; a probabilidade  $P(\text{aceitar } j)$  é dada pela decisão de aceitar (ou não) transições de “subida”. Assim, a aplicação  $\pi$  é estocástica.

A acção  $x_i$  consiste na selecção de uma solução na vizinhança da solução corrente  $i$ . A aplicação  $\mu$ , a acção associada a cada estado e entrada, é também estocástica, uma vez que as sucessivas acções são geradas aleatoriamente de acordo com uma lei uniforme na vizinhança dos estados. Como o parâmetro  $T$  varia com o tempo, assim um Método com Capacidade de Tolerância tem uma estrutura variável.  $\square$

As cadeias de Markov são utilizadas para estudar a convergência do autómato estocástico Modelo-GH.

**Teorema 2.8** *A cadeia de Markov, induzida por um Método com Capacidade de Tolerância, com temperatura constante, num espaço finito de objectos combinatórios, é ergódica.*

**Demonstração:** Para provar este teorema é necessário mostrar que a cadeia de Markov é irreduzível, aperiódica e persistente positiva (recorrente positiva) ([Fel66, Volume I]).

Uma cadeia de Markov é irreduzível se e só se todos os estados comunicarem ( $p_{ij}^n > 0$  e  $p_{ji}^m > 0$ , para todos os estados). Admitindo que o espaço de objectos combinatórios tem uma métrica finita, ou seja a distância entre qualquer par de soluções é finita e positiva e se um método com capacidade de tolerância satisfizer as duas condições seguintes:

- o procedimento de geração é definido de tal forma que gera todas as soluções que pertencem a uma esfera de raio  $\rho = 1$  com probabilidade uniforme;
- a função  $g(\delta_k, T)$  é tal que a transição, de ordem  $k$ , do estado  $i$  para o seu vizinho  $j$  ocorre com probabilidade  $p_{ij} > 0$ .

Então existe um número mínimo de transições entre dois estados consecutivos,  $n = \rho(i, j) = \rho(j, i) > 0$ , todos os estados comunicam e a cadeia diz-se irreduzível. Numa cadeia de Markov irreduzível e finita todos os estados são recorrentes. Como todos os estados comunicam eles são do mesmo tipo. Assim, para provar que a cadeia é aperiódica basta fazê-lo para um estado. Seja  $s_i$  a solução, tal que  $f(s_j) < f(s_i)$ , para qualquer  $s_j$  e a probabilidade  $p_{ii}^{(1)} > 0$  de acordo com a função  $g$ . O  $m.d.c.\{n : p_{ii}^{(n)} > 0\} = 1$  sendo a cadeia de Markov aperiódica.  $\square$

A distribuição estacionária da cadeia de Markov pode ser encontrada resolvendo o sistema linear apresentado em (2.34). Outros métodos propostos para resolver problemas de optimização combinatórios pertencem a esta classe dos autómatos estocásticos Tipo-GH Modelo-S.

A questão fulcral é saber como se transforma este autómato num autómato assintoticamente óptimo, isto é, como obter a convergência com probabilidade unitária para um conjunto de soluções óptimas globais. As alterações no Método com Capacidade de Tolerância terão

## 2.6. Comportamento Assimptótico das Transições

de ser efectuadas na função  $g$  que agora será definida de acordo com o critério estocástico original. O decréscimo do parâmetro  $T$  terá que obedecer a uma função que permita à Têmpera Simulada ter condições próximas das exigidas para a convergência.

A Têmpera Simulada é efectivamente um autómato estocástico assintoticamente óptimo Tipo-GH.

**Teorema 2.9** *A Têmpera Simulada é um autómato estocástico Tipo-GH Modelo-S com estrutura variável.*

**Demonstração:** Caso particular de um Método com Capacidade de Tolerância.  $\square$

**Teorema 2.10** *A Têmpera Simulada é um autómato estocástico assintoticamente óptimo Tipo-GH Modelo-S com estrutura variável.*

**Demonstração:** A demonstração de convergência resulta da demonstração anterior e da definição de autómato assintoticamente óptimo.  $\square$

A demonstração seguinte usa apenas uma descrição adequada das transições através de conceitos de Teoria das Probabilidades.

## 2.6 Comportamento Assimptótico das Transições

A prova de convergência que se segue é baseada na forma como evoluem as transições no método de Têmpera Simulada. De uma solução  $s_i$  o mecanismo de transição gera uma nova solução  $s_j \in \mathcal{V}(s_i, \tau)$ . Cada transição está dependente de três possíveis decisões relativas à aceitação ou rejeição da nova solução, condicionadas pelo valor da transição

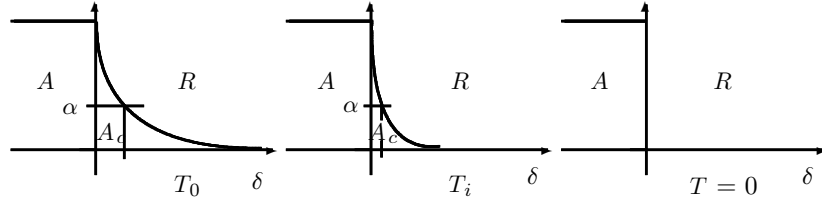
$$\delta = f(s_j) - f(s_i),$$

por um parâmetro  $T$  e por um critério estocástico. Deste modo, uma solução  $s_j$  é aceite ( $A$ ) se  $\delta < 0$ . A solução é aceite condicionalmente ( $A_c$ ) se  $\delta \geq 0$  e  $\exp(-\delta/T) \geq \alpha$ , onde  $\alpha$  é escolhido aleatoriamente no conjunto

$$\alpha \in [\exp(-\delta_{\max}/T), 1]$$

e  $\delta_{\max}$  é o maior valor do conjunto  $\Delta$ . A solução  $s_j$  é rejeitada ( $R$ ) se  $\delta \geq 0$  e  $\exp(-\delta/T) < \alpha$ .




 Figura 2.1 Critério de aceitação/rejeição para alguns valores de  $T$ 

O algoritmo pode ser descrito pelas diferentes decisões relativas às transições a um determinado nível de temperatura  $T$ . Estas decisões podem ser agrupadas em sucessões de símbolos, compostas pelas correspondentes decisões  $\{A, A_c, R\}$ , do tipo

$$D_T = A A A A_c R R A_c A A A R A_c A R A A_c \dots$$

Desta forma-se uma sucessão  $\{D_{T_k}\}$  de sucessões relativas a cada valor da temperatura.

Pretende-se demonstrar que, quando  $T$  se aproximar de zero e for gerado um número infinito de soluções, o custo das soluções se aproxima do custo da solução óptima.

Pela análise da figura 2.1, observa-se que, quando  $T \rightarrow 0$ , o algoritmo apenas aceita ou rejeita, uma vez que dado  $\delta \geq 0$  o  $\lim_{T \rightarrow 0} \exp(-\delta/T) = 0$ , ou seja, a aceitação condicionada tem probabilidade nula e a rejeição tem probabilidade total. Deste modo, e como o número de transições é infinito, a solução óptima é identificada.

**Teorema 2.11** *O custo das soluções aproxima-se do custo óptimo quando a temperatura se aproxima de zero e um número infinito de transições é gerado, isto é,*

$$\forall \epsilon \in \mathbb{R}^+ \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{T \rightarrow 0} P(|f(s) - f(s^*)| < \epsilon) = 1.$$

**Demonstração:** Seja  $f(s) = f(s_n, T)$  o custo da solução  $s_{n,T}$  obtida ao fim de  $n$  transições para um valor  $T$ , onde  $f(s_{n,T})$  é o custo da solução  $s_n$  definido num valor  $T$ . Seja  $X_{n,T}$  uma variável aleatória definida por  $f(s_{n,T})$  e  $k = f(s^*)$  o valor óptimo.

As possíveis sequências  $D_T$ , que conduzem à solução  $s_{n,T}$ , podem ser agrupadas da seguinte forma:

$$D_T^{(1)} = \{\text{sequências que não envolvem } A_c\}$$

e

$$D_T^{(2)} = \{\text{sequências que envolvem } A_c\}.$$

## 2.6. Comportamento Assimptótico das Transições

Para o primeiro conjunto  $D_T^{(1)}$ ,  $f(s_n)$  resulta no mínimo dos custos gerados que são independentes e identicamente distribuídos. A probabilidade de  $D_T$  pertencer a  $D_T^{(1)}$  é estritamente positiva e define-se por  $p_T$ . Assim,  $X_{n,T}$  pode ser representada por

$$X_{n,T} = \begin{cases} Y_n & \text{com probabilidade } p_T \\ Z_n & \text{com probabilidade } 1 - p_T \end{cases}$$

onde  $Y_n$  é o mínimo das variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com limite inferior do suporte  $k = \inf\{x : F(x) > 0\}$ . Deste modo,

$$P(|X_{n,T} - k| > \epsilon) = P(|Y_n - k| > \epsilon)p_T + P(|Z_n - k| > \epsilon)(1 - p_T).$$

Tomando o limite da expressão anterior

$$\lim_{T \rightarrow 0} P(|X_{n,T} - k| > \epsilon) = P(|Y_n - k| > \epsilon)$$

e sabendo que  $\lim_{T \rightarrow 0} P(|Z_n - k| > \epsilon)(1 - p_T) = 0$ , uma vez que  $P(|Z_n - k| > \epsilon) \leq 1$  e  $p_t$  tende para um.

Deste modo,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(|Y_n - k| > \epsilon) = \lim_{n \rightarrow \infty} (1 - F(\epsilon))^n,$$

onde  $F$  é a função distribuição do custo das soluções, obtém-se

$$\forall \epsilon > 0, 1 - F(k + \epsilon) < 1 \implies \lim_{n \rightarrow \infty} (1 - F(k + \epsilon))^n = 0.$$

□

O função custo aproxima-se do custo óptimo quando a temperatura tende para zero e se executa um número de transições infinito.

O estudo da convergência da Simulação da Têmpera leva a um melhor conhecimento do seu funcionamento e permite a justificação de algumas características que se observam. No entanto, este conhecimento não contribui de uma forma directa para a construção de algoritmos. No sentido de criar uma forma expedita de gerar algoritmos introduz-se no capítulo seguinte o conceito de Entropia que, posteriormente, será usado na construção do método da Têmpera controlada pela Entropia.

## Capítulo 3

# Entropia

O conceito de Entropia surge neste trabalho como consequência da análise do processo físico da Têmpera na Mecânica Estatística. Na continuação deste estudo são encontradas *pontes* entre outras áreas como a Teoria das Probabilidades, Processos Estocásticos e Teoria da Informação. Procura-se perceber como se relaciona este conceito entre as diferentes áreas, as propriedades mais importantes e uma forma de o aplicar a algoritmos para problemas de Optimização Combinatória.

Na procura de um modelo adequado às características intrínsecas de cada concretização, com um conjunto de características já referidas, estudou-se a forma de transpor para a Têmpera Simulada alguns dos conceitos físicos da Têmpera, com a ideia de melhorar o desempenho dos algoritmos estocásticos. Contudo, a falta de um formalismo matemático capaz de modelar com exactidão as principais propriedades existentes no fenómeno físico da Têmpera teve como consequência o abandono desta estratégia.

O conceito de Entropia [BAR94] manteve-se presente e foi com a interpretação estocástica, proposta por Claude Shannon [Sha48] no âmbito da Teoria da Informação, que se estabeleceu uma caracterização da Têmpera Simulada, tendo esta sido utilizada, posteriormente, como suporte da *Têmpera controlada pela Entropia*. Deste método resulta um modelo para a Têmpera Simulada em que o conceito de Entropia ocupa um lugar de controlo de todo o processo. De certa forma, o único conceito físico com interpretação directa neste novo modelo foi o conceito da Entropia intimamente ligada à noção de temperatura.

### 3.1 O Conceito de Entropia

Existem conceitos que resistem à passagem do tempo, uns pela sua importância, outros pela capacidade que têm de se adaptar aos novos domínios da ciência. A Entropia, mais do que qualquer outro conceito, mantém bem viva a sua importância, a sua utilidade e, porque não, o seu mistério. A literatura sobre a Entropia está repleta de autores que têm procurado explicações para este excelente desempenho, se bem que um dos mais esclarecedores foi apresentado por John Von Neumann:

*No one really understands entropy (in the sense of Physics). Therefore, if you know what you mean by it and you use it when you are in an argument, you will win every time.*

John von Neumann<sup>1</sup>

O termo Entropia, como conceito científico, foi apresentado pela primeira vez na Termodinâmica, em 1850, por Clausius; posteriormente é feita uma interpretação probabilística no contexto da Mecânica Estatística, atribuída a Boltzmann, no ano de 1877. Em 1906, Plank estabelece outra relação de grande sucesso entre este conceito e a Teoria das Probabilidades.

É, no entanto, com Claude Shannon que se estabelecem as bases da Teoria da Informação. No célebre trabalho [Sha48], ele apresenta a Entropia como uma medida estatística obedecendo a um conjunto de axiomas que resultam numa expressão que se prova ser única:

$$H(Y) = - \sum_{i=1}^n p_i \log p_i \quad (3.1)$$

onde os  $p_i$  são as probabilidades associadas a um qualquer acontecimento. Posteriormente, em 1957, E. T. Jaynes [Jay57] reexamina o Método da Máxima Entropia e aplica-o a uma grande variedade de problemas.

Não ficaria completa esta introdução se não se fizesse alusão a duas obras: *Information Theory*, de Robert Ash [Ash65], em 1965, e *Science and Information Theory*, de Brillouin [Bri56], em 1956. São obras de referência e contribuíram de forma decisiva para a estruturação deste modelo, que se queria simples e suficientemente completo para reproduzir a realidade.

O termo Entropia, actualmente usado em muitos domínios da ciência, tem origem na Física com o significado de degradação de energia, relaciona os movimentos e colisões de

---

<sup>1</sup>Citado por E. T. Jaynes em [Jay97].

### 3.2. Domínios de Aplicação

partículas, ficando desta forma como uma noção indissociavelmente ligada à desordem. Encontram-se referências a um conceito similar nos trabalhos de Carnot, embora num contexto muito particular. Desde então, muitos autores têm tentado definir e entender o conceito de Entropia.

Em 1987, Boltzmann e Maxwell usam a Teoria das Probabilidades para analisar sistemas físicos de muitas partículas. Esta interpretação probabilística conduz o conceito de Entropia aos domínios da Mecânica Estatística. No entanto, o trabalho de Claude Shannon [Sha48] merece um destaque muito especial: é com ele que o conceito de Entropia transcende a sua ideia original. Alguns anos após Shannon o ter apresentado, Jaynes propõe o Método da Máxima Entropia destinado a resolver problemas caracterizados por informação insuficiente [Jay57]. Nestes problemas apenas se conhecem medidas macroscópicas, como a média ou a variância e as probabilidades óptimas serão aquelas que maximizam a entropia.

A entropia tem tomado lugar de destaque em diversos campos da ciência. Algumas áreas da Matemática como: a Teoria da Codificação, os Sistemas Dinâmicos, a Lógica, a Teoria de Algoritmos e a Inferência Estatística, e de uma forma mais geral a Economia, a Biologia, as Ciências Sociais e Humanas souberam adaptar e interpretar este conceito às suas necessidades.

## 3.2 Domínios de Aplicação

Em 1948, motivado pelo problema de transmitir uma mensagem de forma eficiente através de um canal de comunicação, Shannon [Sha48] introduziu uma forma probabilística e revolucionária de analisar a comunicação. A par desta nova forma de ver um sistema de comunicação, criou todo o envolvimento teórico do conceito de entropia. Na Teoria da Informação são usadas ferramentas matemáticas como a Teoria das Probabilidades e a Teoria Ergódica para analisar os dados que vão evoluindo num canal de comunicação, estando na origem aos sistemas de comunicação que se desenvolveram nestes últimos anos muito rapidamente. Igual desenvolvimento teve a Teoria da Codificação que, usando ferramentas da Álgebra e da Teoria dos Números, levou à criação de códigos extremamente elaborados. Ambas as áreas deram respostas eficazes aos desafios que a massificação do uso da Informática lhes vem colocando.

Em meados dos anos cinquenta, Andrei Kolmogorov adaptou a noção de Entropia de Shannon à teoria de Sistemas Dinâmicos e mostrou como a Entropia pode ser usada para

analisar tais sistemas. Em 1961, Roy Adler *et al.* introduziram o conceito de Entropia Topológica. Anos mais tarde, Kolmogorov criou uma teoria de Complexidade de Problemas baseada na Entropia, ao mesmo tempo que Ray Solomonoff [Sol90] desenvolve a noção de Probabilidade Algorítmica e Martin-Loef usa ideias similares para desenvolver a teoria de Aleatoriedade Algorítmica.

Em 1870, Ludwig Boltzmann e Willard Gibbs introduzem diferentes conceitos de Entropia, ambos baseados na Teoria das Probabilidades. Na Inferência Estatística, a Entropia teve como principal impulsionador Ronald Fisher, em 1925, cujo significado está muito próxima da entropia de Shannon. Na década de cinquenta, Edwin Jaynes publica o artigo “Information Theory and Statistical Mechanics” [Jay57], onde a Mecânica Estatística é reformulada em termos probabilísticos usando o Princípio da Máxima Entropia [GN92]. Esta reformulação leva a uma simplificação matemática de alguns problemas de Mecânica Estatística através da possibilidade de inferir propriedades com base em informação incompleta. Desde então, Jaynes, desiludido com a política de publicação de artigos nas principais revistas, inicia a escrita de um extenso livro apenas com edição electrónica. Nesta obra de referência, *Probability Theory: The Logic of Science* [Jay97], a Teoria de Probabilidades Baesiana é tratada como uma ciência de inferência plausível. A interessante relação entre Sequências Típicas e Máxima Entropia aparece como uma via de introduzir o conceito de Entropia utilizando apenas propriedades da Teoria de Probabilidades [BAR99].

Os Sociólogos têm aplicado o conceito de Entropia de várias formas, desde a interpretação estatística de resultados até ao tratamento da informação, por vezes insuficiente e afectada por ruído que têm de analisar. Os Biólogos compreendem e utilizam todo o potencial das ideias de Shannon. Em trabalhos recentes, os Ecologistas usam o conceito de Entropia como uma medida da biodiversidade. Os Biólogos Evolucionistas continuam a desenvolver a ideia de tomar como modelo para a evolução certos conceitos usados em Termodinâmica. Próximo desta abordagem está a quantificação hierárquica da organização de um ecossistema usando a entropia como medida [BW86, Ayr94].

Nos anos trinta, John von Neumann introduz o *operador de entropia*, definido de forma análoga ao valor de entropia em Mecânica Quântica. Nos nossos dias os Físicos tentam generalizar o operador de entropia às álgebras não-comutativas. Após Jaynes ter introduzido o Princípio da Máxima Entropia, dois cientistas, Lars Onsager e Ilya Prigogine, galardoados com o prémio Nobel, desenvolvem a Teoria da Mecânica Estatística em Não-Equilíbrio [Str95].

### 3.3. Teoria da Informação

Muitas das ideias da Teoria do Caos são inspiradas no conceito de Entropia, que ao longo destes anos tem sido uma área de trabalho muito frutuosa, tanto em resultados teóricos como nas suas aplicações a problemas práticos [Cav94].

Após esta breve passagem por um conjunto de áreas onde a Entropia tem sido aplicada, regressa-se à Teoria da Informação e ao conceito incontornável que ela encerra – o conceito de Entropia.

## 3.3 Teoria da Informação

No artigo escrito por Claude Shannon [Sha48, SW49] e referido por vários autores como sendo o texto base da Teoria da Informação, fala-se sobretudo de Teoria da Comunicação. O próprio autor classifica-o como “a teoria geral da comunicação”.

Escreveu Shannon que o problema fundamental da comunicação é a reprodução exacta ou aproximada de uma mensagem enviada através de um sistema de comunicação. Este sistema é descrito muito sucintamente por um gerador de mensagens, um codificador e um canal afectado de ruído; do outro lado temos um decodificador e o receptor da mensagem. As mensagens não podem ser dissociadas da sua parte conceptual que, afectadas pelo ruído do sistema, tornam a tarefa de as decodificar muito complexa. A mensagem que se obtém é no fundo uma entre um conjunto de mensagens possíveis. A Teoria da Informação aparece neste contexto como uma forma de avaliar o sucesso da comunicação. É, assim, uma teoria estocástica cujo objectivo principal é o de explicar, o que é relevante num sistema de comunicação, que se pode ilustrar com os seguintes dois problemas:

- o problema de armazenamento de dados. Shannon mostra que se pode compactar a informação removendo redundâncias;
- o problema da transmissão de mensagens através de um canal afectado pelo ruído. De igual forma, Shannon mostra que é possível, usando apenas a redundância, combater a degradação das mensagens sujeitas a ruído.

De um ponto de vista puramente matemático, a Teoria da Informação é apresentada como um modelo matemático representativo de um sistema de comunicação que compreende o estudo de um teorema – o teorema fundamental da Teoria da Informação. Estabelece este teorema que se pode transmitir informação através de um canal a uma qualquer velocidade,

menor que a capacidade do canal, com uma probabilidade de erro arbitrariamente pequena [Ash65]. O conceito de Entropia [BAR94] aparece neste contexto ligado à necessidade de codificar uma mensagem para ser transmitida através de um canal de informação com a menor probabilidade de erro possível. A Entropia dada por (3.1) e definida por Shannon[SW49] dá uma resposta prática à forma de codificar uma mensagem para ser transmitida. Com o conceito da Entropia definido de uma forma axiomática, da qual resulta uma fórmula única para sua medida, são abertas várias portas em diferentes domínios de investigação.

### 3.3.1 O Teorema de Shannon

No cerne da Teoria de Informação encontra-se o problema de quantificar a entropia, muitas vezes também chamada *incerteza*. Sendo esta uma medida associada a acontecimentos estocásticos, os argumentos usados devem ser semelhantes aos usados em Teoria das Probabilidades. Deste modo, cria-se uma axiomática da qual resulta uma medida da entropia, que se prova ser única, usando apenas argumentos básicos da Teoria das Probabilidades. Na literatura consultada, a axiomática é definida de uma forma rigorosa no livro *Information Theory* [Ash65] de Robert Ash, em 1965. Em [BA94] são feitos mais alguns comentários a esta axiomática.

Nas linhas seguintes são expostos os quatro axiomas de uma forma muito sucinta.

- Axioma 1 – A entropia aumenta proporcionalmente ao aumento das possibilidades de escolha. No caso de acontecimentos equiprováveis, a entropia é estritamente monótona crescente com  $n$ ,

$$H\left(\frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n}\right) = f(n).$$

- Axioma 2 – Num acontecimento descrito por duas variáveis aleatórias,  $X$  com  $n$  acontecimentos equiprováveis e  $Y$  com  $l$  acontecimentos equiprováveis, a experiência conjunta tem  $n \times l$  acontecimentos e a entropia é dada por  $f(nl)$ .

Se o valor de  $X$  for conhecido, a entropia associada a  $Y$  não é afectada, uma vez que  $X$  e  $Y$  são independentes. A entropia conjunta, associada às duas variáveis  $X$  e  $Y$ , menos a entropia obtida através do conhecimento da variável  $X$ , continua a ser a entropia associada a  $Y$ . Deste modo,

$$f(nl) = f(n) + f(l).$$



### 3.3. Teoria da Informação

- Axioma 3 – O chamado *Axioma de Grupo* traduz a situação geral de acontecimentos que não são equiprováveis. O espaço de acontecimentos  $X$  é dividido em dois conjuntos,  $A = \{x_1, x_2, \dots, x_r\}$  e  $B = \{x_{r+1}, x_{r+2}, \dots, x_n\}$ . Em seguida define-se um acontecimento da seguinte forma:

- selecciona-se um dos dois grupos  $A$  ou  $B$ , com probabilidades  $(p_1 + \dots + p_r)$  e  $(p_{r+1} + \dots + p_n)$ , respectivamente;
- escolhe-se um qualquer valor  $x_i$  do conjunto seleccionado anteriormente.

Se o conjunto  $A$  for o escolhido, pode-se seleccionar um valor  $x_i$  com probabilidade  $p_i/(p_1 + \dots + p_r)$ , isto é, a probabilidade condicionada de escolher um  $x_i$ , dado que este pertence ao conjunto  $A$ . O mesmo raciocínio pode ser feito para o grupo  $B$ . Deste modo, o conjunto  $A$  tem probabilidade  $p_j/\sum_{i=1}^r p_i$ ,  $j = 1, \dots, r$  para cada  $x_j$ . De igual modo, para o conjunto  $B$  em que  $j = r + 1, \dots, n$ .

Sendo  $Y$  o resultado desta experiência, a probabilidade de  $Y = x_1$  é dada por:

$$\begin{aligned} P(Y = x_1) &= P(A \text{ ser escolhido e } x_1 \text{ ser seleccionado}) \\ &= P(A \text{ ser escolhido})P(x_1 \text{ ser seleccionado}|A \text{ ser escolhido}) \\ &= \left(\sum_{i=1}^r p_i\right) \frac{p_1}{\sum_{i=1}^r p_i} = p_1. \end{aligned}$$

Como se verifica para todos  $x_i$ , com  $i = 1, \dots, n$ , pode-se afirmar que  $X$  e  $Y$  têm a mesma distribuição.

A entropia das duas experiências, é dada por:

$$\begin{aligned} H(p_1, \dots, p_n) &= H(p_1 + \dots + p_r, p_{r+1} + \dots + p_n) + \\ &+ (p_1 + \dots + p_r)H\left(\frac{p_1}{\sum_{i=1}^r p_i}, \dots, \frac{p_r}{\sum_{i=1}^r p_i}\right) + \\ &+ (p_{r+1} + \dots + p_n)H\left(\frac{p_{r+1}}{\sum_{i=r+1}^n p_i}, \dots, \frac{p_n}{\sum_{i=r+1}^n p_i}\right), \\ &r = 1, \dots, n - 1. \end{aligned}$$

- Axioma 4 – Finalmente, pretende-se que  $H(p_i)$  seja uma função contínua em  $p_i$ . Intuitivamente, espera-se que uma pequena perturbação nas probabilidades corresponda uma pequena alteração no valor da entropia.

Com base nestes quatro axiomas enuncia-se o Teorema de Shannon, cuja demonstração se pode encontrar nos textos citados no início desta secção.

**Teorema 3.1** *A única função que satisfaz os axiomas, indicados anteriormente, é dada por*

$$H(p_1, \dots, p_n) = -C \sum_{i=1}^n p_i \log_a p_i \quad (3.2)$$

onde  $C$  é um número arbitrário positivo e a base do logaritmo é qualquer inteiro maior do que 1.

A primeira propriedade que decorre desta expressão é que a entropia é não negativa, uma vez que  $-p_i \log p_i \geq 0$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ . A partir deste momento, se nada for referido, a base do logaritmo será *neperiana*.

Existem, no entanto, outras propriedades que derivam da necessidade de usar as probabilidades conjunta e condicionada, resultando definições de entropia conjunta e condicionada.

### 3.3.2 Entropia Conjunta e Condicionada

Sejam  $X$  e  $Y$  duas variáveis aleatórias discretas, associadas à mesma experiência aleatória. Define-se probabilidade conjunta, como sendo:

$$p(x_i, y_j) = P(X = x_i, Y = y_j) \quad , \quad i = 1, \dots, n \quad , \quad j = 1, \dots, r. \quad (3.3)$$

O número de acontecimentos possíveis é  $nr$ . A entropia conjunta, associada a  $X$  e  $Y$  é dada por

$$H(X, Y) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^r p(x_i, y_j) \log p(x_i, y_j), \quad (3.4)$$

que facilmente se generaliza para  $n$  variáveis aleatórias.

A entropia conjunta pode ser relacionada com a entropia das variáveis isoladamente,

$$H(X, Y) \leq H(X) + H(Y), \quad (3.5)$$

sendo a igualdade válida quando  $X$  e  $Y$  forem independentes.

Dadas duas variáveis aleatórias  $X$  e  $Y$  e conhecendo um valor particular  $X = x_i$ , a distribuição de probabilidade condicionada é dada por  $P(Y|X = x_i)$  e a entropia condicionada por

$$H(Y|X = x_i) = \sum_{j=1}^r P(y_j|x_i) \log P(y_j|x_i). \quad (3.6)$$

### 3.3. Teoria da Informação

A entropia condicionada de  $Y$ , dado  $X$ , é dada por:

$$\begin{aligned} H(Y|X) &= P(x_1)H(Y|X = x_1) + \dots + P(x_n)H(Y|X = x_n) \\ &= - \sum_{i=1}^n P(X_i) \sum_{j=1}^r P(y_j|x_i) \log P(y_j|x_i), \end{aligned} \quad (3.7)$$

e pela definição de probabilidade conjunta

$$P(x_i, y_i) = P(x_i)P(y_i|x_i).$$

Deste modo,

$$H(Y|X) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^r P(y_j, x_i) \log P(y_j|x_i). \quad (3.8)$$

Da definição de entropia conjunta resulta que

$$H(X, Y) = H(X) + H(Y|X) = H(Y) + H(X|Y),$$

uma vez que

$$\begin{aligned} H(X, Y) &= - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^r P(x_i, y_j) \log P(x_i, y_j) \\ &= - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^r P(x_i, y_j) \log [P(x_i)P(y_j|x_i)] \\ &= - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^r P(x_i, y_j) \log P(x_i) - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^r P(x_i, y_j) \log P(y_j, x_i) \\ &= - \sum_{i=1}^n P(x_i) \log P(x_i) + H(Y|X) \\ &= H(X) + H(Y|X). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Através de um raciocínio idêntico obtém-se a segunda igualdade.

A entropia pode também ser definida para uma variável aleatória contínua, se bem que a maior parte das propriedades da entropia definida anteriormente não sejam verificadas.

#### 3.3.3 Entropia de uma variável aleatória contínua

Seja  $X$  uma variável aleatória contínua e  $p(x)$  a sua função densidade de probabilidade. Define-se a entropia de  $X$  como sendo

$$H(X) = - \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log p(x) dx, \quad (3.10)$$

desde que este integral exista.

Em contraste com a situação anterior, a entropia de uma variável aleatória contínua pode tomar qualquer valor, positivo ou negativo.

Sejam  $X$  e  $Y$  variáveis aleatórias definidas sobre o mesmo espaço, com densidade de probabilidade conjunta  $p(x, y)$ . A entropia conjunta  $H(X, Y)$ , é dada por:

$$H(X, Y) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} p(x, y) \log p(x, y) dx dy,$$

e a entropia condicionada de  $Y$  dado  $X$  é

$$H(X|Y) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} p(x, y) \log p(x|y) dx dy,$$

onde  $p(y|x) = p(x, y)/p(x)$  é a função de densidade de  $Y$  dado  $X$ .

Como na entropia de uma variável aleatória discreta, pode-se deduzir um conjunto de resultados bastante interessantes.

**Lema 3.1** *Sejam  $p(x)$  e  $q(x)$  funções densidade de probabilidade de duas variáveis contínuas definidas sobre o mesmo suporte.*

a) *Se  $-\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log q(x) dx$  é finito, então  $-\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log p(x) dx$  existe e*

$$-\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log q(x) dx \leq -\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log p(x) dx; \quad (3.11)$$

*a igualdade só se verifica se  $p(x) = q(x)$ .*

b) *Se  $-\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log p(x) dx$  é finito, então  $-\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log q(x) dx$  existe e verifica a equação (3.11).*

**Demonstração:** Uma vez que  $\log b \leq b - 1$ , verificando-se a igualdade apenas quando  $b = 1$ , tem-se que  $p(x) \log[q(x)/p(x)] \leq q(x) - p(x)$ , neste caso a igualdade só se verifica se  $p(x) = q(x)$ . Por convenção, quando  $p(x) = q(x) = 0$  considera-se  $0 \cdot \infty = 0$ . Deste modo,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} dx \leq \int_{-\infty}^{+\infty} q(x) dx - \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx = 1 - 1 = 0$$

e uma vez mais, a igualdade só é verificada se  $p(x) = q(x)$ .

Assim,

$$-p(x) \log p(x) = p(x) \log \frac{q(x)}{p(x)} - p(x) \log q(x) \quad (3.12)$$

e deste modo

$$-\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log q(x) dx \leq -\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log p(x) dx$$

### 3.4. Entropia Máxima

Pelo facto da desigualdade (3.11) se verificar e o integral  $-\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log q(x) dx$  ser finito, pode-se concluir usando a equação (3.12) que a igualdade só se verifica se

$$-\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log \frac{q(x)}{p(x)} dx = 0$$

o que implica que  $p(x) = q(x)$  (uma vez que  $p(x) > 0$  para pelo menos um  $x$ ).

Através de um raciocínio análogo prova-se a alínea b). □

O Lema 3.1 tem como consequências imediatas os seguintes resultados:

**Teorema 3.2** *Sejam  $X$  e  $Y$  variáveis aleatórias com função densidade de probabilidade conjunta  $p(x, y)$ . Assumindo que  $H(X)$  e  $H(Y)$  são ambas finitas, então:*

- a)  $H(X, Y)$  existe e  $H(X, Y) \leq H(X) + H(Y)$ ; a igualdade só se verifica se  $X$  e  $Y$  forem independentes;
- b)  $H(Y|X)$  e  $H(X|Y)$  existem e  $H(X, Y) = H(X) + H(Y|X) = H(Y) + H(X|Y)$ ;
- c)  $H(Y|X) \leq H(Y)$ ; a igualdade só verifica se  $X$  e  $Y$  forem independentes.

Dos vários textos onde esta demonstração é feita, a mais clara e concisa é apresentada em [Ash65].

Na sua essência, não existem diferenças significativas entre a entropia discreta e a entropia contínua. No caso discreto, a entropia é uma forma absoluta de medir o grau de aleatoriedade de uma variável. No caso contínuo, essa medida é relativa aos sistema de coordenadas.

## 3.4 Entropia Máxima

O Método da Máxima Entropia dá resposta a um problema concreto da Teoria das Probabilidades: como estimar as probabilidades de um dado acontecimento quando apenas se conhecem as suas características “macroscópicas”, como a média e a variância? O Método da Máxima Entropia responde a esta questão encontrando um vector de probabilidades que maximiza a Entropia.

Formalmente esta questão é traduzida por um problema de maximização, usando uma função genérica  $h(x_i)$ ,

$$H(p_1, \dots, p_n) = - \sum_{i=1}^n p_i h(x_i)$$

com as seguintes restrições  $\sum_{i=1}^n p_i = 1$  e média,  $\overline{h(x)} = \sum_{i=1}^n p_i h(x_i)$ . Este resultado encontra-se demonstrado em [BA94].

Assim, a entropia é máxima quando os acontecimentos são equiprováveis ( $p_i = 1/n$ ). Pode-se deste modo escrever

$$H(p_1, \dots, p_n) \leq \log n. \quad (3.13)$$

No caso de uma variável aleatória contínua  $X$ , qual será a função densidade de probabilidade  $p(x)$  que maximiza a entropia?

### 3.4.1 Distribuição Gaussiana

Em todos os trabalhos que usem ferramentas da Teoria de Probabilidades a distribuição Gaussiana ocupa, quase sempre, um lugar de destaque.

A que se deve tal sucesso? Desde logo, na discussão que o nome desta distribuição tem suscitado. A controvérsia gerada em torno da origem da expressão “Distribuição Normal” remontará a 1920 quando Karl Pearson afirma ter introduzido “anos atrás” a referida expressão, no sentido de evitar a disputa entre Gauss e Legendre, mas não dá qualquer referência. Do mesmo modo, em 1967, Hilary Seal atribui a primeira utilização deste termo a Galton, não apresentando também qualquer referência. Provavelmente, Gauss terá usado o termo “normal” nos seus trabalhos sobre equações no sentido de “perpendicularidade”, expressando desta forma o sentido geométrico das mesmas, isto é, a distância mínima de um ponto (o estimador) a um plano (a restrição) é o comprimento da perpendicular. Como Pearson observa, o termo “Distribuição Normal” é pouco correcto, pois presuppõe um juízo de valor e leva a pensar – consciente ou inconscientemente – que as outras distribuições são anormais em certo sentido.

O termo “distribuição Gaussiana” é igualmente pouco correcto. Não existindo nenhum mistério à sua volta, é no entanto controverso já que foi usado pela primeira vez em 1733, por DeMoivre, como aproximação à distribuição Binomial, trabalho que foi encontrado, em 1924, por Karl Pearson. Em 1783, Laplace estuda esta distribuição cuidadosamente, traçando a sua natureza e os seus principais resultados. Tudo isto foi feito quando Gauss tinha apenas seis anos. Foi, no entanto, com os trabalhos de Gauss que, em 1809, lhe foi dada a projecção que alcançou e que chegou aos nossos dias.

A distribuição Gaussiana é usada por Laplace para descrever a *distribuição de erros*,

### 3.4. Entropia Máxima

facto contestado por Willy Feller, em 1950, dizendo que a “distribuição da frequência de erros reais quase nunca são Gaussianos”. Contrariando esta ideia, continua-se a usar a distribuição Gaussiana com o sucesso que se conhece na estimação de parâmetros. O facto de ser a distribuição estatística mais usada, tem duas razões principais: a *normalidade* aparece naturalmente em muitas situações reais da Física, da Biologia e das Ciências Sociais; a outra razão prende-se com a reconhecida importância na Inferência Estatística.

Uma variável aleatória  $X$  cuja função densidade de probabilidade é dada por

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \frac{-(x - \mu)^2}{2\sigma^2} \quad -\infty < x < +\infty \quad (3.14)$$

tem distribuição Gaussiana com esperança matemática  $-\infty < \mu < +\infty$  e desvio padrão  $\sigma > 0$  e abreviadamente escreve-se  $N(\mu, \sigma)$ .

Voltando à questão inicial, uma justificação plausível para o sucesso da distribuição Gaussiana baseia-se no princípio da Máxima Entropia, pois esta distribuição maximiza a Entropia sujeita a determinadas restrições.

**Teorema 3.3** *Numa variável aleatória  $X$  absolutamente contínua com desvio padrão  $\sigma$ , a entropia é máxima quando a sua função densidade de probabilidade,  $p(x)$ , é Gaussiana.*

**Demonstração:** O problema é formulado da seguinte forma:

$$\max H(X) = - \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log p(x) dx \quad (3.15)$$

sujeito às seguintes restrições:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) x^2 dx = \sigma^2$$

e

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx = 1.$$

Este é um problema clássico do Cálculo de Variações, conhecido como problema Isoperimétrico. A sua resolução envolve o uso de Multiplicadores de Lagrange de acordo com [Pin93, Teorema 3.4, pág. 55]. Obtém-se assim,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[x, p(x)] &= \int_{-\infty}^{+\infty} (-p(x) \log p(x) + \lambda p(x) x^2 + \mu p(x)) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) (-\log p(x) + \lambda x^2 + \mu) dx. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Seja então  $p^*(x)$  a função maximizante. Desta forma

$$\mathcal{L}[x, p^*(x)] \geq \mathcal{L}[x, p(x)] \quad \forall p(x) \in C^0$$

e, em particular,

$$\mathcal{L}[x, p^*(x)] \geq \mathcal{L}[p^*(x) + \epsilon r(x)] \quad \forall \epsilon \in \mathbb{R}, \forall r(x) \in C^0.$$

Então,

$$w(\epsilon) = \mathcal{L}[x, p^*(x) + \epsilon r(x)]$$

e pela condição de extremo  $w'(\epsilon)|_{\epsilon=0} = 0$ , isto é,

$$\begin{aligned} w'(\epsilon) &= \int_{-\infty}^{+\infty} r(x)(-\log(p^*(x) + \epsilon r(x)) + \lambda x^2 + \mu) - \\ &\quad - \frac{r(x)}{p^*(x) + \epsilon r(x)}(p^*(x) + \epsilon r(x))dx \\ w'(0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} r(x)(-\log(p^*(x)) + \lambda x^2 + \mu) - r(x))dx \end{aligned}$$

pelo lema fundamental do Cálculo de Variações [Pin93] e fazendo  $w'(0) = 0$ , vem  $-\log(p^*(x)) + \lambda x^2 + \mu - 1 = 0$ . Resolvendo esta equação, obtém-se:

$$p^*(x) = \exp(\lambda x^2 + \mu - 1).$$

Substituindo este valor nas restrições e, resolvendo o sistema, encontram-se os Multiplicadores de Lagrange e

$$p^*(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(\frac{-x^2}{2\sigma^2}\right). \quad (3.17)$$

Uma vez que a função dada pela equação (3.15) é côncava então o ponto extremo é um máximo.  $\square$

**Teorema 3.4** *A função (3.17) é a função densidade de probabilidade de uma distribuição Gaussiana e o valor da entropia máxima é dado por:*

$$H(X) = \log(\sqrt{2\pi e}\sigma). \quad (3.18)$$

**Demonstração:** A função densidade é dada por (3.17) e

$$-\log H(x) = \log(\sqrt{2\pi}\sigma) + \frac{-x^2}{2\sigma^2}.$$

Deste modo a entropia é dada por:

$$\begin{aligned} H(x) &= - \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log p(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log(\sqrt{2\pi}\sigma) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \frac{-x^2}{2\sigma^2} dx \\ &= \log(\sqrt{2\pi}\sigma) + \frac{\sigma^2}{2\sigma^2} \\ &= \log(\sqrt{2\pi e}\sigma). \end{aligned} \quad (3.19)$$



### 3.4. Entropia Máxima

□

O resultado que se apresenta em seguida é apenas uma outra forma de mostrar que a Entropia tem um limite superior.

**Teorema 3.5** *Dada uma variável aleatória  $X$  qualquer com função densidade de probabilidade  $p(x)$  e variância positiva  $\sigma^2$ , a entropia existe e é dada por:*

$$H(X) \leq \log(\sqrt{2\pi e}\sigma).$$

*A igualdade só se verifica se a distribuição de  $X$  for uma distribuição Gaussiana.*

**Demonstração:** Seja  $X$  uma variável aleatória qualquer com função densidade de probabilidade  $p(x)$ , média  $\mu$  e variância  $\sigma^2$ . Fazendo  $q(x) = (2\pi\sigma^2)^{1/2} \exp(\frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2})$  no Lema 3.1,

$$\begin{aligned} - \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \log q(x) dx &= - \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) \left[ \frac{1}{2} \log(\pi\sigma^2) + \frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2} \right] dx \\ &= \frac{1}{2} \log(\pi\sigma^2) + \frac{\sigma^2}{2\sigma^2} \\ &= \log(\sqrt{2\pi e}\sigma). \end{aligned}$$

□

#### 3.4.2 Distribuição Exponencial

A distribuição Exponencial é bastante usada na construção de modelos estocásticos. Diz-se que uma variável aleatória  $X$  tem distribuição exponencial com parâmetro  $\lambda > 0$ , se a sua função densidade de probabilidade for dada por

$$f(x) = \begin{cases} \lambda \exp(-\lambda x) & x > 0 \\ 0 & x \leq 0 \end{cases}$$

ou de uma forma equivalente, se a sua função distribuição for dada por

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(y) dy = \begin{cases} 1 - \exp(-\lambda x) & x \geq 0 \\ 0 & x < 0. \end{cases}$$

A esperança matemática de  $X$  é dada por

$$E[X] = \frac{1}{\lambda}$$

e a variância  $Var[X] = E[X^2] - E[X]^2$  é dada por

$$Var[X] = \frac{1}{\lambda^2}.$$

Desta distribuição, deduzem-se propriedades muito interessantes, como por exemplo, a propriedade “sem memória” traduzida pela seguinte expressão

$$P(X > s + t | x > t) = P(X > s),$$

condição que se pode escrever da seguinte forma

$$\frac{P(X > s + t, X > t)}{P(X > t)} = P(X > s)$$

ou ainda, como

$$P(X > s + t) = P(X > s)P(X > t). \quad (3.20)$$

Esta condição é satisfeita se  $X$  for distribuída Exponencialmente. Além disso, esta é a única distribuição<sup>2</sup> com esta propriedade. Se  $X$  é uma variável aleatória e  $\overline{F(x)} = P(X > x)$ , da equação (3.20) deduz-se que  $\overline{F(s+t)} = \overline{F(s)}\overline{F(t)}$  e  $\overline{F(x)}$  satisfaz a equação funcional  $g(s+t) = g(s)g(t)$ , cuja solução é dada pela função  $g(x) = \exp(-\lambda x)$ .

Outra propriedade igualmente interessante permite comparar duas variáveis aleatórias exponencialmente distribuídas. Sejam essas variáveis  $X_1$  e  $X_2$  com médias  $1/\lambda_1$  e  $1/\lambda_2$ , respectivamente. Pretende-se calcular  $P(X_1 < X_2)$ , isto é,

$$\begin{aligned} P(X_1 < X_2) &= \int_0^\infty P(X_1 < X_2 | X_2 = x) \lambda_2 \exp(-\lambda_2 x) dx \\ &= \int_0^\infty P(X_1 < x) \lambda_2 \exp(-\lambda_2 x) dx \\ &= \int_0^\infty (1 - \exp(-\lambda_1 x)) \lambda_2 \exp(-\lambda_2 x) dx \\ &= \int_0^\infty \exp(-\lambda_2 x) \lambda_2 dx - \lambda_2 \int_0^\infty \exp(-(\lambda_1 + \lambda_2)x) dx \\ &= 1 - \frac{\lambda_2}{\lambda_1 + \lambda_2} = \frac{\lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_2} \end{aligned} \quad (3.21)$$

Sejam  $X_1, X_2, \dots, X_n$  variáveis Exponencialmente distribuídas e independentes de parâmetros  $\lambda_i, i = 1, \dots, n$ . A menor variável aleatória deste conjunto é exponencialmente distribuída de parâmetro igual à soma de todos os parâmetros. Isto é,

$$P(\min\{X_1, \dots, X_n\} > x) = P(X_i > x \text{ para cada } i = 1, \dots, n)$$

---

<sup>2</sup>Resultado conjecturado.

### 3.4. Entropia Máxima

$$\begin{aligned}
&= \prod_{i=1}^n P(X_i > x), \quad \text{pela independência das variáveis} \\
&= \prod_{i=1}^n \exp(-\lambda_i x) \\
&= \exp\left(-\sum_{i=1}^n \lambda_i x\right). \tag{3.22}
\end{aligned}$$

Esta distribuição está relacionada com a Entropia da seguinte forma.

**Teorema 3.6** *A função densidade de probabilidade de uma variável aleatória  $X$  que toma apenas valores positivos, com esperança matemática  $\mu$ , que maximiza a entropia é dada por*

$$g(x) = \frac{1}{\mu} \exp(-x/\mu).$$

**Demonstração:** A demonstração deste resultado faz-se de forma análoga à do teorema 3.3.  $\square$

Verifica-se que a distribuição definida por esta função densidade é Exponencial de parâmetro  $1/\mu$ , e a entropia máxima é dada por

$$H[X] = 1 + \log \mu. \tag{3.23}$$

Pela definição de entropia de uma variável aleatória contínua,

$$\begin{aligned}
H[X] &= E[-\log g(x)] \\
&= E\left[-\log\left(\frac{\exp(-x/\mu)}{\mu}\right)\right] \\
&= \frac{E[X]}{\mu} + \log \mu.
\end{aligned}$$

Como a esperança matemática de  $X$  é  $\mu$ , então

$$H[X] = 1 + \log \mu. \tag{3.24}$$

Uma abordagem diferente ao conceito de Entropia, agora como medida da *incerteza* de um acontecimento, é apresentada em *Entropia, Sequências Típicas e Máxima Entropia* [BAR99], tendo por base os trabalhos [Pap91, Pap90]. O uso de Sequências Típicas é uma excelente forma de introduzir o conceito de Entropia, onde todas as propriedades podem ser deduzidas através destas sequências. Este trabalho [BAR99] foi escrito com a preocupação de divulgar o conceito de Entropia e mostrar que este pode ser uma medida estatística do *grau de*

*aleatoriedade*, isto é, de como estão distribuídas as probabilidades de um dado acontecimento. Pelo facto de ser limitada,  $0 < H(X) \leq \log n$ , pode ser, por exemplo, interpretado como uma medida de comparação do grau de aleatoriedade entre diversas amostras. Este conceito, raramente tratado em livros de probabilidades e estatística, é visto como um tema de fronteira que associa a incerteza e a informação com a termodinâmica, mecânica estatística ou a teoria da codificação.

### 3.5 Entropia Máxima e Sequências Típicas

Na teoria das probabilidades, a interpretação empírica da entropia é baseada nas propriedades de longas sequências geradas pela repetição de um acontecimento aleatório. Este facto conduz à noção de sequência típica e oferece uma justificação do princípio da máxima entropia.

Considere-se uma experiência apenas com dois acontecimentos,  $\mathcal{A}$  e  $\bar{\mathcal{A}}$  com probabilidades  $p$  e  $q = 1 - p$ , respectivamente. Diz-se, assim, que a partição  $A = \{\mathcal{A}, \bar{\mathcal{A}}\}$  é formada pelos dois acontecimentos.

Se a experiência se repetir  $n$  vezes, obtém-se uma sequência  $s$  da forma

$$s = \underbrace{\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}\mathcal{A}\bar{\mathcal{A}}\mathcal{A}\mathcal{A} \dots \mathcal{A}}_n, \quad (3.25)$$

que é um acontecimento do espaço de resultados  $\mathcal{L}_n$ , e a sua probabilidade é igual a

$$P\{s\} = p^k q^{n-k}, \quad (3.26)$$

onde  $k$  é o número de vezes que  $\mathcal{A}$  ocorre.

Intuitivamente, se  $p$  for diferente de 0.5 e  $n$  muito grande, é provável que não ocorra um pequeno número de sequências da forma (3.25). A intuição é baseada no facto de o número de sucessos ser directamente proporcional ao número médio de vezes que  $\mathcal{A}$  ocorre,  $k \approx np$ . Assim, de todas as  $2^n$  sequências possíveis, somente aquelas para o qual  $k$  é próximo de  $np$  são mais prováveis de ocorrer. Este tipo de sequências são chamadas *típicas* e todas as restantes atípicas<sup>3</sup>. Se  $t$  é uma sequência típica, então  $k \approx np$  e  $n - k \approx n - np = nq$  e substituindo na equação (3.26), obtém-se

$$\begin{aligned} P\{t\} &= p^k q^{n-k} \approx p^{np} q^{nq} \\ &= e^{np \log p + nq \log q} = e^{-nH(A)}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

---

<sup>3</sup>Também chamadas *sequências raras*.

### 3.5. Entropia Máxima e Sequências Típicas

onde  $H(A)$  é a entropia da partição  $A = \{\mathcal{A}, \bar{\mathcal{A}}\}$ .

O conjunto  $\mathcal{T}$  contém todas as sequências típicas e é quase certo que  $k = np$ , uma vez que quase todas as sequências observadas são típicas, sendo deste modo,  $P\{\mathcal{T}\} \approx 1$ .

Sendo  $n_t$  o número de sequências típicas, conclui-se que

$$P\{\mathcal{T}\} = n_t P\{t\} \approx 1 \quad (3.28)$$

e

$$n_t \approx e^{nH(A)}. \quad (3.29)$$

Este resultado fundamental relaciona o número de sequências típicas com a entropia da partição  $A = \{\mathcal{A}, \bar{\mathcal{A}}\}$ , e evidencia uma ligação entre a entropia e a frequência relativa, o que conduz a uma justificação empírica do princípio da máxima entropia.

Se  $p = 0.5$ , então  $H(A) = \log 2$  e  $n_t \approx e^{n \log 2} = 2^n$ . Neste caso, todas as sequências cuja expressão é da forma (3.25) são típicas. Para qualquer outro valor de  $p$ ,  $H(A)$  é menor que  $\log 2$ . Sendo assim, para um valor grande de  $n$

$$n_t \approx e^{nH(A)} \ll e^{n \log 2} = 2^n. \quad (3.30)$$

Generalizando, para partições do tipo  $A = \{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2, \dots, \mathcal{A}_N\}$ , facilmente se deduz que

$$n_t \approx e^{nH(A)} \ll e^{n \log N} = N^n. \quad (3.31)$$

Então, para valores muito grandes de  $n$ , o número de sequências possíveis  $2^n$  é muito maior que o número de sequências típicas  $e^{nH(A)}$ . Este resultado é fundamental na teoria da codificação. A equação (3.30) mostra que  $H(A)$  é máximo se e só se  $n_t$  é máximo. O princípio pode ser estabelecido da observação do número  $n_t$ . Se  $p_i$  é um valor que maximiza  $H(A)$ , o resultante número de sequências típicas também é máximo.

#### 3.5.1 Entropia de Partições e Variáveis Aleatórias

**Definição 3.1** Se  $\mathcal{L}$  for o espaço de resultados possíveis e  $A = \{\mathcal{A}_1, \dots, \mathcal{A}_N\}$  uma partição de  $\mathcal{L}$ , que contém  $N$  acontecimentos  $\mathcal{A}_i$ , então a expressão

$$H(A) = - \sum_{i=1}^N p_i \log p_i, \quad p_i = P(\mathcal{A}_i) \quad (3.32)$$

é a entropia da partição  $A$ .

Um acontecimento  $\mathcal{A}$  e o seu complementar  $\bar{\mathcal{A}}$  formam uma partição  $A = \{\mathcal{A}, \bar{\mathcal{A}}\}$ , e a entropia é dada por

$$H(A) = -(p \log p + q \log q), \quad p = P(\mathcal{A}), \quad q = P(\bar{\mathcal{A}}).$$

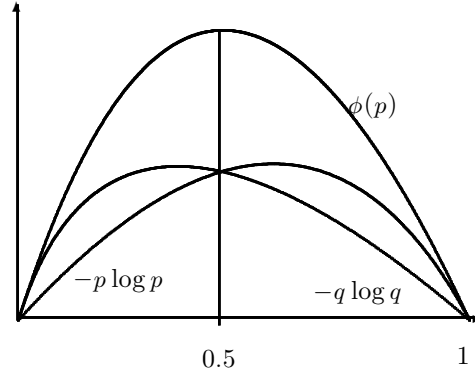


Figura 3.1 Representação da função  $\phi(p) = -p \log p - q \log q$

Na figura 3.1 estão representadas as funções  $-p \log p$ ,  $-q \log q$  e a sua soma  $\phi(p) = -p \log p - q \log q$ , onde  $q = 1 - p$ . A função  $\phi(p)$  é simétrica em relação ao ponto  $p = 0.5$ , então a entropia da partição  $\{\mathcal{A}, \bar{\mathcal{A}}\}$  é máxima se os acontecimentos  $\mathcal{A}$  e  $\bar{\mathcal{A}}$  tiverem a mesma probabilidade. A demonstração é baseada no seguinte resultado.

**Lema 3.2** *Dados os conjuntos  $\{p_i, i = 1, 2, \dots, N\}$  e  $\{c_i, i = 1, 2, \dots, N\}$  de números reais positivos, tais que:*

$$\sum_{i=1}^N p_i = 1 \quad e \quad \sum_{i=1}^N c_i = 1,$$

*verifica-se que*

$$-\sum_{i=1}^N p_i \log p_i \leq -\sum_{i=1}^N p_i \log c_i. \quad (3.33)$$

**Demonstração:** Pelo facto de a função  $-\log z$  ser concáva vem que  $\log z \leq z - 1$ .

### 3.5. Entropia Máxima e Sequências Típicas

Fazendo  $z = c_i/p_i$ , vem que

$$\sum_{i=1}^N p_i \log \frac{c_i}{p_i} \leq \sum_{i=1}^N p_i \left( \frac{c_i}{p_i} - 1 \right) = \sum_{i=1}^N c_i - \sum_{i=1}^N p_i = 0.$$

Então,

$$0 \geq \sum_{i=1}^N p_i \log \frac{c_i}{p_i} = \sum_{i=1}^N p_i \log c_i - \sum_{i=1}^N p_i \log p_i,$$

obtém-se deste modo o resultado (3.33).  $\square$

**Teorema 3.7** *A entropia de uma partição  $A$  de  $N$  acontecimentos é máxima se todos estes acontecimentos forem equiprováveis, isto é,  $p_i = 1/N$  e*

$$H(A) = \log N. \quad (3.34)$$

**Demonstração:** Usando a desigualdade básica definida por (3.33) e fazendo  $c_i = 1/N$ , obtém-se

$$-\sum_{i=1}^N p_i \log p_i \leq -\sum_{i=1}^N p_i \log \frac{1}{N} = \log N.$$

$\square$

Deste teorema resulta que

$$0 \leq H(A) \leq \log N, \quad (3.35)$$

uma vez que  $H(A) = \log N$  se e só se  $p_i = \dots = p_N = 1/N$  e  $H(A) = 0$  se e só se  $p_i = \begin{cases} 1 & i = k \\ 0 & i \neq k. \end{cases}$

As seguintes propriedades são consequência directa da convexidade da função  $-p \log p$ .

**Teorema 3.8** *As partições  $A$  e  $B$  são formadas por  $N$  e  $N + 1$  acontecimentos, respectivamente. Os  $N - 1$  acontecimentos  $\mathcal{A}_2, \dots, \mathcal{A}_N$  são os mesmos em ambas partições. Os acontecimentos  $\mathcal{B}_a$  e  $\mathcal{B}_b$  são disjuntos e  $\mathcal{A}_1 = \mathcal{B}_a \cup \mathcal{B}_b$ , sendo assim*

$$p_1 = P(\mathcal{A}_1) = P(\mathcal{B}_a) + P(\mathcal{B}_b) = p_a + p_b.$$

*Mostra-se que*

$$H(A) < H(B). \quad (3.36)$$

**Demonstração:** Pelo facto da função  $w(p) = -p \log p$  ser concava segue-se que

$$w(p_a + p_b) < w(p_a) + w(p_b). \quad (3.37)$$

Então,

$$-p_1 \log p_1 - \sum_{i=2}^N p_i \log p_i \leq -(p_a \log p_a + p_b \log p_b) - \sum_{i=2}^N p_i \log p_i,$$

donde se obtém a desigualdade (3.36) uma vez que o lado esquerdo da expressão é  $H(A)$  e o lado direito é igual a  $H(B)$ .  $\square$

**Teorema 3.9** *As partições  $A$  e  $C$  são formadas por  $N$  acontecimentos cada. Os  $N - 2$  acontecimentos  $\mathcal{A}_3, \dots, \mathcal{A}_N$  são os mesmos em ambas partições. Os acontecimentos restantes são definidos da seguinte forma:  $\mathcal{A}_1 \cup \mathcal{A}_2 = \mathcal{C}_a \cup \mathcal{C}_b$ , e  $p_1 = P(\mathcal{A}_1)$ ,  $p_2 = P(\mathcal{A}_2)$ ,  $p_a = P(\mathcal{C}_a)$  e  $p_b = P(\mathcal{C}_b)$ .*

*Se  $p_1 < p_a < p_b < p_2$  então*

$$H(A) < H(C). \quad (3.38)$$

**Demonstração:** Se  $p_1 + p_2 = p_a + p_b$  então,  $p_a = p_1 + \epsilon < p_2 - \epsilon = p_b$ . Da convexidade da função  $w(p) = -p \log p$  e se  $\epsilon > 0$  então

$$w(p_1) + w(p_2) < w(p_1 + \epsilon) + w(p_2 - \epsilon). \quad (3.39)$$

Então,

$$-p_1 \log p_1 - p_2 \log p_2 - \sum_{i=3}^N p_i \log p_i \leq -p_a \log p_a - p_b \log p_b - \sum_{i=3}^N p_i \log p_i$$

e obtém-se a desigualdade (3.38), uma vez que o lado esquerdo da expressão é  $H(A)$  e o lado direito é igual a  $H(C)$ .  $\square$

Resumindo, a Entropia pode ser vista de uma forma:

- axiomática [Ash65, SW49], onde  $H(A)$  é um valor caracterizado por um conjunto de axiomas que conduzem à definição única da expressão (3.1).
- empírica, que diz respeito ao modelo conceptual de  $H(A)$  em relação às  $n$  observações e pode ser usado para determinar  $H(A)$  experimentalmente. Uma sequência típica  $t$  é um acontecimento com probabilidade  $e^{-nH(A)}$ . Aplicando a interpretação de frequência relativa mostra-se que, em  $m$  repetições, se o acontecimento  $t$  ocorrer  $n$  vezes e  $m$  for grande, então  $P(t) \approx e^{-nH(A)} = n/m$ ; assim

$$H(A) \approx -\frac{1}{n} \log \frac{n}{m}.$$

- subjectiva, onde se afirma que  $H(A)$  é igual à incerteza acerca da ocorrência do acontecimento  $\mathcal{A}$  numa única realização de  $\mathcal{L}$ .



### *3.5. Entropia Máxima e Sequências Típicas*

Na Têmpera controlada pela Entropia, o conceito de Entropia aparece como base do modelo matemático para a Têmpera Simulada.

## Capítulo 4

# A Têmpera controlada pela Entropia

A *Têmpera controlada pela Entropia* [BAR] é apresentada como a junção de um conceito, a Entropia, com uma metaheurística, a Têmpera Simulada. Este é um método que gera algoritmos através da realização de um esquema de arrefecimento baseado no comportamento da entropia. Esta ideia tinha sido abordada uns anos antes e apresentada em “On Simulating Thermodynamics” [RBA93], embora com um tratamento incipiente do conceito de Entropia.

Como se observou, o esquema de arrefecimento é composto por quatro decisões que importa recordar:

- o valor da temperatura inicial;
- o tempo de permanência em cada nível de temperatura;
- a forma de descer a temperatura;
- o critério de paragem.

Na literatura, existe um conjunto muito vasto destes esquemas, desde o original proposto por Kirkpatrick [KGV83] até à extensa compilação produzida por Emile Aarts [LA87, AK90].

Na abordagem que agora se apresenta, o processo físico da Têmpera está muito presente, sendo realçado sempre que se julgar necessário.

Na Têmpera, a temperatura inicial está estabelecida para cada sólido. Cada sólido tem o seu ponto de fusão, onde os átomos têm um elevado grau de liberdade. Na Têmpera

Simulada a temperatura inicial é de crucial importância para o desempenho dos algoritmos. O espaço de soluções deve ser percorrido com a maior amplitude possível. Teoricamente, deseja-se que qualquer solução tenha igual probabilidade de ser “visitada”. Esta situação é conseguida se a temperatura for suficientemente elevada. Neste contexto, o advérbio “suficientemente” é muito importante, uma vez que este valor deve depender de características intrínsecas de cada concretização. Assim como os diversos sólidos têm pontos de fusão diferentes, as diferentes concretizações de um problema têm concerteza uma “temperatura característica”. Pretende-se encontrar forma de quantificar a característica intrínseca de cada concretização. Encontrou-se um “mecanismo”, traduzido por um algoritmo, que se designou por *entropómetro*. O *entropómetro* mede a entropia de uma concretização que, como se verá adiante, reflecte de algum modo as suas principais características. Resumindo, procura-se que a temperatura inicial seja adequada às características intrínsecas da concretização. A esta propriedade do método chamou-se *adaptabilidade*.

A decisão seguinte prende-se com a avaliação do equilíbrio a uma dada temperatura. Na Mecânica Estatística este é simulado pelo Algoritmo de Metropolis. Na Têmpera Simulada, pretende-se determinar o tempo de permanência num patamar de temperatura, ou seja, o comprimento das sucessivas cadeias de Markov homogéneas, expressão herdada do modelo clássico da Têmpera Simulada. O equilíbrio térmico é caracterizado pela distribuição de Boltzmann. A transposição deste conceito para a Têmpera Simulada é realizado através da aproximação da distribuição de Boltzmann a uma distribuição Exponencial. Não tendo uma relação directa com esta abordagem, no trabalho de G. Royer [Roy89] são apresentados aspectos sobre a obtenção do equilíbrio estatístico de inegável interesse.

O tempo de permanência em cada patamar de temperatura e a forma como esta desce, estão inexoravelmente ligados. Se a temperatura for descida de uma forma descontrolada o algoritmo corre sérios riscos de seleccionar uma solução “longe” do óptimo global. Se a temperatura for descida de uma forma controlada, mas muito “lenta”, o algoritmo pode não obter uma solução em tempo útil. É necessário que exista um meio termo entre estas duas formas de descer a temperatura. O controlo da temperatura tem de ser efectuado segundo a natureza da concretização e a forma como o algoritmo evolui.

O critério de paragem está uma vez mais relacionado com a Entropia. O algoritmo deixa de ser executado quando a entropia atingir o seu valor limite.

Como se observa, a Entropia ocupa um lugar estratégico nesta abordagem. Da mesma

#### 4.1. O Modelo

forma que o processo físico está dependente dos gradientes de energia, a Temperatura Simulada depende das diferenças da função objectivo calculadas em soluções vizinhas. A Entropia, neste método, depende directamente da temperatura qualquer alteração deste valor deve repercutir-se no valor da entropia.

### 4.1 O Modelo

O modelo matemático que se apresenta tem características muito próprias. Pretende-se que os parâmetros necessários à geração de algoritmos dependam directamente de propriedades do modelo, os quais devem obedecer a algumas características precisas, como a adequação ao problema e geração automática em tempo real. A estratégia encontrada consiste na análise estocástica usando ferramentas da Teoria das Probabilidades e Estatística. O modelo a construir deve ser rico em propriedades e a Entropia deve ser o elo de ligação entre o modelo e a construção de parâmetros, para que todas as propriedades teóricas possam ser transpostas para os algoritmos através de estimadores.

A magnitude de uma transição é dada por  $\delta : S \times S \rightarrow \mathbb{R}$ , valor que é obtido de uma forma aleatória no espaço de soluções  $S$ . No desenrolar de um algoritmo, o número de transições efectuadas é da ordem dos muitos milhões. O modelo é construído sobre uma análise estocástica destas transições. O seu número e a forma como são obtidas levam a que se possa considerar uma variável aleatória contínua como forma de as representar.

São constituídas amostras das magnitudes de *transições aleatórias*, isto é, são transições efectuadas por execução do mecanismo de transição sobre o conjunto das soluções. Uma análise gráfica destas amostras aponta para que se formule a hipótese de que a distribuição teórica associada às magnitudes seja Gaussiana. Aplicou-se o teste de Kolmogorov–Smirnov [Pap90] para decidir entre as duas hipóteses seguintes:

$$H_0 : G(x) = G_0(x) \quad \text{e} \quad H_1 : G(x) \neq G_0(x)$$

onde  $G_0(x)$  é a distribuição Gaussiana e  $G(x)$  é a distribuição das magnitudes. Muito sucintamente, o teste de Kolmogorov–Smirnov é aplicado a distribuições cujas funções de variáveis aleatórias são independentes. Nestes casos a lista dos dados pode ser convertida num estimador não-enviesado,  $E_m(x)$ , da função distribuição acumulada. Se os  $m$  acontecimentos são definidos pelos valores  $x_1, \dots, x_m$ , então  $E_m(x)$  é uma função dada pelos valores à esquerda

de  $x$ . Se estes valores forem ordenados por ordem crescente, a função é constante entre valores de  $x$  consecutivos. É uma função que pode ser representada por patamares com igual probabilidade  $1/m$ , para todos os  $x_i$ . A estatística usada é dada por:

$$D = \max_{-\infty < x < \infty} |E_m(x) - p(x)|,$$

onde  $p(x)$  é a função distribuição conhecida.

Na aplicação do teste de Kolmogorov-Smirnov foi usado um programa comercial chamado SPSS<sup>1</sup>. O resultado da aplicação do teste indica que não se deve rejeitar a hipótese de a distribuição ser Gaussiana.

No modelo considera-se que as transições aleatórias têm distribuição Gaussiana de média nula, tal qual tinha sido observado graficamente.

Este método tem como característica principal a capacidade de tomar decisões contra o sentido de optimização, ou de outra forma, o Algoritmo de Metropolis tem essa capacidade. As transições efectuadas no decorrer deste algoritmo pertencem ao conjunto  $\Delta = \{\delta : \delta \geq 0\}$  e são o suporte positivo de outra distribuição de probabilidade. Estabelecendo a analogia entre a distribuição de Boltzmann, que representa a probabilidade de encontrar o sólido num estado com determinada energia, e a probabilidade de efectuar transições com determinada magnitude positiva, ajusta-se uma variável aleatória contínua  $X$  com função densidade de probabilidade dada por

$$g(x, T) = \frac{\exp(-x/T)}{Z}, \quad x \geq 0,$$

onde  $Z$  é a Função de Partição dada pelo integral

$$Z = \int_0^{+\infty} \exp(-x/T) dx = T. \quad (4.1)$$

**Teorema 4.1** *A função densidade  $g(x, T)$  da variável aleatória contínua  $X$  segue uma distribuição Exponencial [Fel66], de parâmetro  $1/T$ , denotada por  $Exp(1/T)$ , dada por*

$$g(x, T) = \frac{\exp(-x/T)}{T}, \quad (4.2)$$

com esperança matemática  $\mu = T$  e variância  $\sigma^2 = T^2$ .

A sua função distribuição é dada por:

$$G(x, T) = 1 - \exp(-x/T). \quad (4.3)$$

---

<sup>1</sup>SPSS for Windows Release 7.5.1 (Dec. 20 - 1996).

#### 4.1. O Modelo

Com a caracterização formal do algoritmo efectuada, resta observar a sua adequação ao funcionamento do algoritmo. Estabelecido um valor  $\alpha \in [\exp(-\delta_{\max}/T), 1[$ , a probabilidade de rejeitar uma transição de magnitude superior é dada por  $P(X > \alpha) = 1 - P(X < \alpha) = 1 - G(\alpha, T)$ . Uma transição de magnitude inferior a  $\alpha$  é aceite condicionalmente com probabilidade  $G(\alpha, T)$ .

O modelo é construído com base no comportamento da sequência de variáveis aleatórias  $X_1, \dots, X_n$ , Exponencialmente distribuídas de parâmetros  $1/T_1, \dots, 1/T_n$ .

A Figura 4.1 representa a sequência das funções de distribuição referente a cada uma das variáveis aleatórias, definidas sobre o mesmo suporte. Quando o valor da temperatura cresce indefinidamente a função de distribuição toma o valor zero. Nesta situação, todas as transições são aceites e rejeitadas com igual probabilidade, levando a que o algoritmo percorra o maior número de soluções possíveis. Fazendo a analogia com um sistema físico, este é o estado em que os átomos têm maior liberdade.

Quando a temperatura toma o valor zero, a função de distribuição é unitária. No caso concreto, a probabilidade de aceitar condicionalmente uma solução é nula. Assim, o algoritmo apenas aceita e rejeita, e espera-se que, no final, identifique uma solução, que se espera ser próxima da óptima. Fazendo uma vez mais a analogia com a Física, o sistema encontra-se num estado elementar.

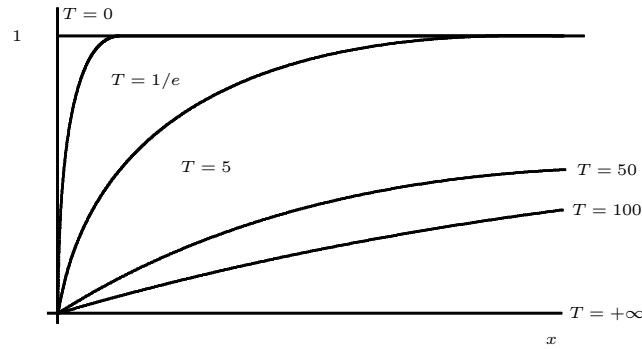


Figura 4.1 Sequência de Funções de Distribuição

**Teorema 4.2** *A sequência das funções de distribuição,  $G(X, T_n)$ , converge para a distribuição limite 1.*

**Demonstração:** Como o  $\lim_{n \rightarrow \infty} T_n = 0$ , então  $\lim_{n \rightarrow \infty} 1 - \exp(-x/T_n) = 1$ . □

A descida da temperatura conduz a uma relação de ordem na sequência de funções de distribuição de acordo com a seguinte definição [WTM93].

**Definição 4.1** *Uma variável aleatória  $X$  domina estocasticamente outra variável aleatória  $Y$  se  $G_X(x) > G_Y(x)$ , onde  $G_X(x)$  e  $G_Y(x)$  são as funções distribuição das variáveis aleatórias contínuas  $X$  e  $Y$  definidas sobre o mesmo suporte, respectivamente.*

No caso da Têmpera conduzida pela Entropia,

**Teorema 4.3** *A variável aleatória  $X_{n+1}$  domina estocasticamente a variável aleatória  $X_n$ .*

**Demonstração:** Basta ver que,

$$\begin{aligned} T_n &> T_{n+1} \\ -x/T_n &> -x/T_{n+1}, \quad x > 0 \\ 1 - \exp(-x/T_n) &< 1 - \exp(-x/T_{n+1}) \\ G(x, T_n) &< G(x, T_{n+1}). \end{aligned} \tag{4.4}$$

□

Como consequência directa da equação (3.21) pode-se quantificar a probabilidade de uma variável aleatória  $X_n$  ser menor que  $X_{n+1}$ . Sabendo que são independentes e que as respectivas esperanças matemáticas são  $T_n$  e  $T_{n+1}$ , a probabilidade é dada por

$$\begin{aligned} P(X_n < X_{n+1}) &= \int_0^{+\infty} P(X_n < X_{n+1} | X_{n+1} = x) \frac{\exp(-x/T_{n+1})}{T_{n+1}} dx \\ &= \frac{T_{n+1}}{T_n + T_{n+1}}. \end{aligned} \tag{4.5}$$

## 4.2 A Entropia da Têmpera

Com base no modelo exposto pretende-se determinar o comportamento da Entropia que, na Física, está intimamente ligado à temperatura. Variações de temperatura provocam alterações no grau de aleatoriedade dos átomos que se reflectem na Entropia. Na Têmpera conduzida pela Entropia as mudanças entre soluções, estados, estão descritas por leis estocásticas dependentes do parâmetro de controlo  $T$ , a temperatura, e a entropia deve reflectir as diferentes condições a que o sistema está submetido.

## 4.2. A Entropia da Têmpera

Como se observou as transições são descritas por duas variáveis aleatórias com distribuição Gaussiana e Exponencial com suporte no conjunto das transições aleatórias e no conjunto das transições positivas  $\Delta$ , respectivamente.

Note-se que estas duas distribuições maximizam a entropia.

A variável aleatória  $Y$ , que tem como suporte o conjunto das transições aleatórias, tem distribuição  $N(0, \sigma^2)$ . A entropia máxima é dada por

$$H(Y) = \log(\sqrt{2\pi} \sigma) \quad (4.6)$$

e depende unicamente da variância  $\sigma^2$ . No processo da Têmpera Simulada, o espaço de soluções deve ser explorado no sentido de obter a máxima variância e, por consequência, a máxima entropia.

No caso da variável aleatória  $X$ , que tem como suporte o conjunto  $\Delta$ , a entropia e a temperatura estão fortemente correlacionados. A variável aleatória  $X$  tem distribuição exponencial com média  $T$ . Deste modo, o valor máximo da entropia é dado por

$$H(X) = 1 + \ln T, \quad (4.7)$$

resultado obtido pela substituição do valor da esperança matemática em 3.24. Como consequência, a entropia é zero quando  $T = 1/e$ .

Analisando a sequência  $\{X_n\}$  das variáveis aleatórias correspondentes a cada nível de temperatura, mostra-se que

**Teorema 4.4** *A entropia conjunta  $H(\{X_n\})$  é limitada superiormente por  $\sum_{k=1}^n T_k$ .*

**Demonstração:** A demonstração é baseada no seguinte resultado, apresentado em [Ash65],

$$H(X_0, \dots, X_n) \leq H(X_0) + H(X_1) + \dots + H(X_n)$$

e como se conhece a entropia de cada variável aleatória, vem

$$H(\{X_n\}) < n + \log \left( \prod_{k=1}^n T_k \right). \quad (4.8)$$

□

**Teorema 4.5** *Existe uma relação de ordem na sequência das entropias  $\{H(X_i)\}$ , dada por*

$$H(X_0) > H(X_1) > \dots > 0. \quad (4.9)$$



**Demonstração:** Como na sequência das temperaturas existe uma relação de ordem e como o valor da entropia depende do valor da temperatura, a relação (4.9) é imediata.  $\square$

Na Mecânica Estatística, o valor da entropia é calculado a partir do grau do movimento no espaço de fase, mais propriamente, o logaritmo desta medida. Significa isto que, quando se fornece energia ao sistema, aumenta o movimento aleatório e, conseqüentemente, a entropia. É mais uma vez esta a melhor analogia para a entropia que se acaba de definir. Também ela depende directamente da temperatura. Como foi variadas vezes salientado, no decorrer do trabalho, a temperatura e a Entropia ocupam um papel fundamental neste modelo.

## Capítulo 5

# Construção de Algoritmos

Ao longo deste trabalho foi proposta uma abordagem original da Têmpera Simulada – a Têmpera controlada pela Entropia. Para este método foi construído um modelo baseado na análise estocástica das transições e dele podem ser deduzidos diversos algoritmos. No caso presente pretende-se que, para cada concretização, exista um algoritmo que respeite as suas características intrínsecas. O método que se apresenta tem subjacente um modelo do qual se podem deduzir diferentes algoritmos pela realização de uma estratégia de arrefecimento simples e directa. Este método foi testado em diversos problemas, desde funções teste mais ou menos complicadas, passando pelo problema de minimização da soma dos elementos de um vector binário, até ao clássico Problema do Caixeiro Viajante.

Em todos estes problemas não se pretendeu encontrar algoritmos competitivos com outros existentes, mas verificar o comportamento desta abordagem em problemas com diferentes graus de dificuldade.

O exemplo de algoritmo que aqui se apresenta tem um esquema de arrefecimento adaptado a cada concretização, gerado em tempo real, e totalmente automático, dependente apenas do modelo da Têmpera controlada pela Entropia. Para o efeito, é necessário encontrar um conjunto de estimadores para que conceitos como a Entropia possam ser efectivamente calculados numericamente.

## 5.1 Estimadores

A entropia máxima referente a transições aleatórias de uma concretização está relacionada com a variância amostral. Antes de executar o próprio algoritmo é constituída uma amostra com os diferentes valores,  $\delta$ , das transições aleatórias. Como se referiu, associou-se a estes valores uma distribuição teórica Gaussiana de média nula. É com base neste pressuposto que se encontra um estimador para o desvio, a raiz quadrada da variância. São efectuadas transições aleatórias até que a média seja próxima de zero o que, necessariamente, varia consoante a natureza de cada concretização.

Como se observou, a entropia máxima é dada por:

$$H = \log(\sqrt{2\pi}\sigma).$$

Sendo estimada por

$$\hat{H} = \log(\sqrt{2\pi v}), \quad (5.1)$$

onde o desvio é estimado pela variância  $v^2 = \frac{\sum_{i=1}^m \delta_i^2}{m}$ , e uma vez que a média é nula, este valor é simplesmente uma *média quadrada* da magnitude das transições aleatórias.

Durante a execução do algoritmo, a entropia referente à variável aleatória  $X$ , cujo suporte é o conjunto  $\Delta$  das transições positivas, é estimada usando a seguinte expressão:

$$\hat{H}^+ = - \sum_{i=1}^m p_i \log p_i, \quad (5.2)$$

onde

$$p_i \approx \frac{\exp(-\delta_i/T)}{\hat{Z}} \quad (5.3)$$

é uma aproximação da probabilidade de efectuar uma transição com valor  $\delta_i$ . Como o valor de  $m$  é muito grande, a função de Partição pode ser estimada por

$$\hat{Z} = \sum_{i=1}^m \exp(-\delta_i/T) \approx T. \quad (5.4)$$

Substituindo em (5.3) o valor da função de Partição, obtém-se a expressão para a probabilidade

$$p_i = \frac{\exp(-\delta_i/T)}{T}.$$

Deste modo, uma aproximação para o valor da entropia é calculada por

$$\hat{H}^+ = - \sum_{i=1}^m \frac{\exp(-\delta_i/T)}{T} \log \frac{\exp(-\delta_i/T)}{T}$$

## 5.2. Um Exemplo de Algoritmo

$$\begin{aligned}
&= - \sum_{i=1}^m \frac{\delta_i}{T} \frac{\exp(-\delta_i/T)}{T} + \log T \sum_{i=1}^m \frac{\exp(-\delta_i/T)}{T} \\
&\approx \frac{\overline{\Delta}}{T} + \log T
\end{aligned} \tag{5.5}$$

onde  $\overline{\Delta} = \frac{\sum_{i=1}^m \delta_i}{m}$ .

Como se observou, a expressão da entropia máxima no modelo é dada por  $H = 1 + \log T$ . Comparando este valor com o estimador obtido,  $\hat{H}^+$ , a entropia será máxima quando  $\overline{\Delta} = T$ .

Note-se, uma vez mais, a relação existente entre todos estes parâmetros e o valor da temperatura.

Com este conjunto de estimadores é possível estabelecer vários esquemas de arrefecimento e desta forma construir vários algoritmos baseados na Temperatura controlada pela Entropia.

## 5.2 Um Exemplo de Algoritmo

Como foi referido, espera-se que um grande número de transições efectuadas sobre o espaço de soluções tenha uma distribuição teórica  $N(0, \sigma^2)$ . A temperatura inicial é encontrada por forma a obter a máxima entropia. Enquanto a média da amostra não for próxima de zero, são efectuadas transições calculando a variância  $v^2$  e, por fim, a entropia máxima, substituindo este valor na expressão (5.1). Este valor é atribuído à temperatura inicial.

O critério de aceitação estocástico é estabelecido de acordo com um valor  $\alpha$  obtido aleatoriamente no conjunto  $[\exp(-\delta_{\max}/T), 1[$ , onde  $\delta_{\max}$  é o máximo do valor das transições. As transições positivas são aceites se  $\exp(\delta/T) \leq \alpha$  e rejeitadas no caso contrário.

A entropia, no decorrer do algoritmo, é calculada usando a equação (5.5). O algoritmo efectua continuamente transições a uma determinada temperatura enquanto  $\hat{H}^+ < \hat{H}_{ant}$ , onde  $\hat{H}_{ant}$  é a entropia associada ao nível de temperatura anterior.

O novo valor do parâmetro  $T$ , temperatura, é calculado com base na Função de Partição usando a expressão (5.4). Uma alternativa para o novo valor da temperatura seria a de igualar este à média da magnitude das transições positivas, calculada no nível anterior de temperatura.

O algoritmo termina a sua execução quando a entropia estiver próxima do seu valor limite, isto é, quando a temperatura atingir um valor próximo de  $1/e$ .

### 5.3 Resultados

O teste do algoritmo foi efectuado em primeiro lugar sobre um conjunto de funções teste retiradas de [TA87]. Em todas as funções testadas o óptimo foi obtido. A implementação foi feita em MatLab que, além da resolução do problema, apresenta ainda uma visualização gráfica do evoluir das soluções até ao óptimo global.

No segundo problema implementado pretende-se minimizar a soma dos elementos de um vector binário de comprimento  $n$ . Formalmente

$$\min_{M \in X} M = \sum_{i=1}^n m_i$$

onde  $X \subset V = \{M : [m_1, \dots, m_n]\}$  e  $m_i \in \{0, 1\}$ . Facilmente se verifica que este problema tem um único ponto de mínimo global. O problema, à primeira vista, parece desprovido de qualquer dificuldade. No entanto, em termos de teste de algoritmos, revela-se extremamente interessante. Este é um problema em que algumas das suas concretizações são mais difíceis de resolver do que outras, isto é, prova-se que pertence à Classe NP [Mar99]. O mecanismo de transição que se usou consiste na troca de um elemento seleccionado aleatoriamente no vector. O problema foi testado com valores de  $n$  entre 3 e 2000 e em todos os casos a solução óptima foi obtida. O tempo de execução variou entre alguns segundos e poucos minutos. O comportamento do algoritmo conduzido pela Entropia demonstrou, neste problema, um excelente desempenho.

Finalmente, testou-se o Problema do Caixeiro Viajante. Como foi referido, não se pretendeu encontrar um método competitivo para a sua resolução, mas sim avaliar o funcionamento de um algoritmo com uma estratégia de arrefecimento muito simples. Usando as palavras de David Jonhson, acerca dos diferentes tipos de algoritmos, não se pretende encontrar um algoritmo tipo “*horse racing*”. Consciente de que existem métodos elaborados e de muito boa qualidade para a resolução deste problema, e exactamente por isso, o teste comparativo dos algoritmos desenvolvidos tornou-se um desafio interessante. Os resultados recentes do *Center for Research on Parallel Computation*, publicados na revista *Parallel Computing Research*,<sup>1</sup> dão conta, de que David Applegate, Robert Bixby e William Cook obtiveram um novo recorde no cálculo da solução de uma concretização com 13 509 cidades. O recorde, agora batido, tinha sido estabelecido, em 1994, com 7397 cidades. Na resolução do problema foram usadas três Digital AlphaServer 4100, com um total de 12 processadores,

---

<sup>1</sup>Vol. 6, nº 2 – Spring/Summer 1998

#### 5.4. Discussão

e um conjunto de 32 PC Pentium-II. O problema demorou cerca de três meses a ser resolvido. O algoritmo, baseado em técnicas de computação paralela, reunia um conjunto de ideias das mais variadas áreas, como por exemplo, poliedros combinatórios, optimização combinatória, programação inteira e linear, estruturas de dados e algoritmos, computação paralela, engenharia de software e análise numérica.

Os resultados computacionais do Problema do Caixeiro Viajante foram efectuados sobre um conjunto de concretizações, de dimensão bem mais modesta, escolhidos aleatoriamente na biblioteca TSPLIB<sup>2</sup>

A implementação foi feita em C e executada em duas máquinas distintas. Todas as concretizações foram testadas o mesmo número de vezes num PC-Pentium II (400 MHz), com sistema operativo Linux, e três HP-750, com sistema operativo UNIX. O mecanismo de transição usado foi a troca dupla, proposto por S. Lin e B. Kernighan [LK73]. Os resultados são apresentados na tabela 5.1, construída com base na execução de 17 problemas retirados da TSPLIB95, com indicação do valor óptimo. O algoritmo foi executado cem vezes para cada concretização, das quais se retiraram os seguintes elementos: a melhor solução e a média de todos os custos das melhores soluções obtidas. Apresenta-se ainda o erro relativo em relação à melhor solução obtida e ao óptimo fornecido pela TSPLIB, entendido como uma medida do desempenho do algoritmo.

## 5.4 Discussão

Observando a tabela 5.1, nota-se que existe uma clara independência entre o desempenho do algoritmo e o número de cidades. O desempenho parece estar condicionado por outros factores, entre os quais se pensa que o mais relevante seja a posição relativa que as cidades ocupam no mapa.

Concretizações como “pr264” e “fl417” parecem apresentar um grau de dificuldade maior ou, simplesmente, a adequação do algoritmo não é a melhor. Não existindo nenhuma justificação aceitável para este facto, nota-se apenas que o mapa destas concretizações representadas revela um tipo de estrutura diferente das restantes. Na figura 5.1 são apresentados dois mapas referentes a duas concretizações, “a535” e “pr264”, com desempenho diferente. Como se pode observar, o posicionamento das cidades em “pr264” é significativamente diferente do

---

<sup>2</sup><http://www.iwr.uni-heidelberg.de/iwr/comopt/TSPLIB95>

Nome	Número de Cidades	Ótimo (da TSPLIB)	Custo da melhor solução	Custo médio de 100 execuções	Erro Relativo
ulysses16	16	65	65	69	0.000
bays29	29	9291	9291	9298	0.000
dantzig42	42	699	699	902	0.000
berlin52	52	7542	7542	10065	0.000
st70	70	678	678	812	0.000
eil76	76	545	545	612	0.000
kroA100	100	21282	22124	22452	0.039
rd100	100	7910	9752	10045	0.230
ch130	130	6110	8539	9675	0.390
ch150	150	6532	6584	10989	0.320
pr264	264	49135	72948	95897	0.585
a280	280	2579	3222	3998	0.249
fl417	417	11861	17929	22989	0.848
a535	535	202310	301540	451956	0.490
pr1002	1002	259045	300164	429154	0.158
fl1577	1577	22204	23005	23183	0.236
d1655	1655	62128	79417	80509	0.278

Tabela 5.1 Resultados da aplicação da Têmpera controlada pela Entropia a concretizações do Problema do Caixeiro Viajante

#### 5.4. Discussão

que em “a535”.

Os tempos de execução que se apresentam são médios em relação às cem vezes em que a concretização é testada. Este valores são apenas indicativos uma vez que é efectuado um conjunto de cálculos que nada têm que ver com a estratégia apresentada, servindo apenas para verificação e controlo. Os tempos de execução apresentados na tabela 5.2 são reveladores

Nome	Número de Cidades	Tempo de execução (horas)
ulysses16	16	0:50
bays29	29	0:55
dantzig42	42	1:50
berlin52	52	2:45
st70	70	3:15
eil76	76	2:30
kroA100	100	10:45
rd100	100	10:35
ch130	130	11:45
ch150	150	10:45
pr264	264	55:50
a280	280	26:55
fl417	417	82:05
a535	535	39:10
pr1002	1002	45:45
fl1577	1577	78:45
d1655	1655	70:15

Tabela 5.2 Tempo médio de 100 execuções do algoritmo

do facto de se testar um problema  $NP$ -completo e mais um forte indicador no sentido da confirmação da hipótese de que  $P \neq NP$ . Parece também existir algum tipo de correlação (inversa) entre a qualidade da solução e o tempo de execução.

Na figura 5.2, obtida com base na tabela 5.3, pode observar-se a forte correlação existente entre a entropia máxima e o erro relativo, que no sentido estatístico é de 0.758.

Neste algoritmo, a entropia máxima das transições aleatórias é um excelente indicador do desempenho do algoritmo.



Nome	Máxima Entropia das transições aleatórias	Erro Relativo
ulysses16	1.9808	0.000
bays29	1.9999	0.000
dantzig42	1.9898	0.000
berlin52	2.0012	0.000
st70	1.9997	0.000
eil76	1.9878	0.000
kroA100	3.7214	0.039
rd100	4.0778	0.230
ch130	3.8426	0.390
ch150	3.9909	0.320
pr264	6.9156	0.585
a280	3.5603	0.249
fl417	6.7686	0.848
a535	3.1304	0.490
pr1002	3.0070	0.158
fl1577	5.0928	0.236
d1655	3.7562	0.278

Tabela 5.3 Máxima Entropia das concretizações obtidas aleatoriamente para cada concretização de uma das 100 execuções do algoritmo

#### 5.4. Discussão

A classificação que se ilustra através da figura 5.3, e a que se chamou *classes de concretizações*, resulta da avaliação da entropia máxima nas transições aleatórias. Nesta figura, é exibida a correlação entre a entropia máxima e o erro relativo.

Este comportamento da entropia máxima em transições aleatórias indica que este pode ser um interessante caminho para se obter uma forma de classificar as concretizações de qualquer problema da classe NP. Esta classificação será uma nova forma de abordar os problemas da classe NP, e terá certamente implicações noutros domínios, como seja a demonstração de que  $P \neq NP$ .